

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**ANTONIO DARÍO VELÁSQUEZ BARRERA**

**MODELO DE TRANSPORTE ELETRÔNICO EM  
DISPOSITIVOS NANOELETROMECAÑICOS**

**Florianópolis**

**2016**



Antonio Darío Velásquez Barrera

**MODELO DE TRANSPORTE ELETRÔNICO EM  
DISPOSITIVOS NANOELETRÔMECÂNICOS**

Dissertação de Mestrado submetida  
ao Programa de Pós-Graduação em  
Física da Universidade Federal de  
Santa Catarina para a obtenção do  
Grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Kahio Tibério  
Mazon.

Florianópolis

2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Velásquez Barrera, Antonio Dario  
MODELO DE TRANSPORTE ELETRÔNICO EM DISPOSITIVO  
NANOELETROMECAÑICOS / Antonio Dario Velásquez Barrera ;  
orientador, Kahio Tibério Mazon - Florianópolis, SC, 2016.  
85 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas.  
Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. Sistemas Nanoeletromecânicos. 3. Mecânica  
Quântica. 4. Não-linearidade. 5. Matriz densidade. I. Mazon  
, Kahio Tibério. II. Universidade Federal de Santa  
Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

Antonio Darío Velásquez Barrera

**MODELO DE TRANSPORTE ELETRÔNICO EM  
DISPOSITIVOS NANOELETRÔMECÂNICOS**

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de **Mestre em Física**, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis, 24 de Agosto de 2016.

---

Prof. Dr. Ivan Helmuth Bechtold  
Coordenador do Programa  
Universidade Federal de Santa Catarina

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Dr. Kahio Tibério Mazon  
Presidente/Orientador -UFSC

---

Prof. Dr. Wagner Tenfen  
Membro Titular -UFSC

---

Prof. Dr. Alexandre Magno  
Silva Santos  
Membro Externo-UFSC

---

Prof. Dr. Felipe Arretche  
Membro Titular -UFSC

---

Prof. Dr. Ivan Helmuth Bechtold  
Membro Titular -UFSC



Dedico este trabalho a minha mãe Ena  
María Barrera Hoyos, que é o motor da  
minha vida.

Te Amo





## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a Deus pela fortaleza que sempre me deu nesses momentos de dificuldade que eu tive.

À minha mãe Ena María Barrera Hoyos agradeço infinitamente pela ajuda dada em diferentes aspectos da minha vida, pelos conselhos, pelo amor incondicional e pela confiança que sempre põe em mim.

Aos meus irmãos pelo carinho e apoio mesmo estando longe.

Ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Santa Catarina, à CNPq e ao Brasil por ter me dado a oportunidade de começar com os meus estudos de pós-graduação.

Um especial agradecimento a Madeleing Taborda Barraza pela ajuda incondicional e constante motivação que me ofereceu em diferentes aspectos durante minha estadia em Florianópolis.

A meu orientador Kahio Tibério Mazon pela paciência imensa que teve comigo nessa longa caminhada que foi o mestrado.

Grato!



## RESUMO

O objeto de estudo desta pesquisa foi estudar o transporte eletrônico em um dispositivo nanoeletromecânico composto por um componente oscilante (pode ser uma nanopartícula condutora, um pilar contendo no seu topo um material condutor, uma barra metálica, entre outros) que se encontra inserido entre dois eletrodos formando assim um circuito elétrico não linear. O componente oscilante é modelado como um poço de potencial que têm estados discretos e os eletrodos como sendo gases de elétrons de comprimento finito que obedecem à distribuição de Fermi-Dirac. Com esse arranjo foi possível estudar o transporte de carga devido ao acoplamento que vamos ter entre a oscilação mecânica do componente oscilante e a carga que está atravessando o circuito. A dinâmica eletrônica neste circuito foi estudada a partir do formalismo de matriz densidade para resolver a equação de Liouville-von Neumann computacionalmente. Nessa dinâmica foram analisados três casos. O primeiro deles é a situação quando temos uma diferença de potencial dependente do tempo, onde foi mostrado que a transferência de carga dá-se de maneira aproximadamente discreta, com períodos intercalados de oscilações coerentes da carga entre o poço quântico e os gases de elétrons. No segundo caso foi estudado a dinâmica de carga sem diferença de potencial mas com o componente oscilante em movimento devido a fatores externos como vibrações do ambiente transmitidas ao dispositivo ou qualquer outro dispositivo externo capaz de fazer oscilar o poço quântico. Nesse caso foi mostrado que o processo é parcialmente previsível durante os intervalos iniciais de simulação, consistindo de transferência ressonante de carga entre os eletrodos e o componente oscilante, bloqueio de transferência, etc, em um processo que ocorre a cada dois períodos distintos devido ao princípio de exclusão de Pauli. No último caso, foi estudado a dinâmica de carga elétrica tanto com movimento mecânico quanto com diferença de potencial onde mostramos que a dinâmica transiente pode ser composta de componentes ôhmicos e discretos, um composto de transferência entre estados não ressonantes e outra entre estados ressonantes.

**Palavras-Chaves:** Sistemas Nanoeletromecânicos, Mecânica Quântica, Não-linearidade, Matriz densidade, Equação de Liouville-von Neumann.



## ABSTRACT

The object of this research was to study the electronic transport in a nanomechanical electron shuttle device consisting of an oscillating component (may be a conductive nanoparticle, a pillar having at its top a conductive material, a metal bar, etc.) which is inserted between two electrodes hereby forming a non-linear electric circuit. The oscillating component is modeled as a potential well having discrete states and the electrodes as electron gases of finite length that obey the Fermi-Dirac distribution. With this arrangement it was possible to study the transport of charge due to the coupling that we have between the mechanical oscillation of the oscillating component and the electrical charge that is going through the circuit. The electronic dynamics in this circuit was studied from the density matrix formalism to solve the equation of Liouville-von Neumann computationally. In this dynamic three cases were analyzed. The first situation is when we have a potential difference time-dependent, where it was shown that charge transfer occurs in a manner approximately discrete, with interspersed periods of coherent oscillations of the electric charge between the quantum well and the electrons gases. In the second case it was studied the dynamics of electric charge without potential difference but with the oscillating component movement due to external factors such as environmental vibrations transmitted to the device or any other external device capable of swinging the quantum well. In this case, it was shown that the procedure is partly predictable during the initial simulation intervals, consisting of resonant charge transfer between the electrodes and the oscillating component, transfer lock, etc, in a process that occurs every two distinct periods due to the Pauli exclusion principle. In the latter case, the electric charge dynamics was studied with mechanical movement and with a potential difference which show that the transient dynamic can be composed of discrete components and ohmic, a compound of transfer between non-resonant states and other between resonant states.

**Keywords:** Nanoelectromechanical Systems, Quantum Mechanics, Non-linearity, Matrix Density, Equation Liouville-von Neumann.



# Lista de Figuras

1.1	Resultado experimental para um dispositivo nanoeletromecânico onde o componente oscilante é uma nanopartícula. A curva 1 é a confirmação de que a corrente flui através da nanopartícula. Se a nanopartícula é removida, o resultado é uma queda na corrente através do dispositivo de várias ordens de grandeza (curva 2). Esta figura foi extraída da referência [7], R. I. Shekhter et al, Versita. . . . .	23
1.2	Esquema do monitoramento de massa através de um ressonador de silício com vibração lateral. Esta figura foi extraída da referência [28]. . . . .	23
1.3	(a). Dimensões típicas de um dispositivo nanoeletromecânico. (b). Vista inclinada do componente oscilante entre os eletrodos. Esta figura foi extraída da referência [7]. . . . .	24
3.1	Dispositivo Nanoeletromecânico contendo apenas um componente oscilante. A parte amarela (incluindo os eletrodos) representa o material condutor e serve como o caminho para o transporte de carga. Esta figura foi extraída da referência [7], R. I. Shekhter et al, Versita. . . . .	38
3.2	(a). Modelo de poços e barreiras de potencial para o dispositivo nanoeletromecânico da figura 3.1 para o caso quando $\Delta V = 0$ . $V_0$ é a altura das barreiras. (b). Caso para quando $\Delta V \neq 0$ . $\Delta V$ é a diferença de potencial entre os eletrodos (o eletrodo da direita tem um potencial $V_4 = 0$ ); $V_1$ é o potencial na primeira barreira; $V_2$ é o potencial no poço quântico central e $V_3$ é o potencial na segunda barreira. A origem do sistema está no começo da primeira barreira. . . . .	40

3.3	Densidade de probabilidade do sistema como um todo considerando dois estados. Como vemos, a densidade do poço quântico central é nula, e portanto temos que a distribuição de probabilidade está localizada fundamentalmente nos gases. Aqui temos $l_1 = l_3 = 50 \text{ \AA}$ e $l_2 = 100 \text{ \AA}$ . . . . .	47
3.4	Densidade de probabilidade do sistema como um todo localizada basicamente no poço quântico central. . . . .	48
3.5	Densidade de probabilidade para o mesmo caso da figura 3.4 mas incluindo mais autofunções. . . . .	49
3.6	Densidade de estados para $l_0 = 3350 \text{ \AA}$ ; $l_2 = 100 \text{ \AA}$ ; $\Delta V = 0$ e $V_0 = 0,020$ hartree. . . . .	50
3.7	Caso assimétrico da densidade de estados da figura 3.6 com $l_1 = 60 \text{ \AA}$ e $l_3 = 20 \text{ \AA}$ . . . . .	52
4.1	Convergencia da população calculada estaticamente para um sistema com duas bandas. Aqui temos que $V_0 = 0.02$ hartree, $l_1 = l_3 = 70 \text{ \AA}$ , $l_2 = 100 \text{ \AA}$ . . . . .	57
4.2	Convergencia da população calculada estaticamente para um sistema com uma banda. Aqui temos que $V_0 = 0.02$ hartree, $l_1 = l_3 = 70 \text{ \AA}$ , $l_2 = 100 \text{ \AA}$ . . . . .	58
4.3	População no poço quântico central sem diferença de potencial. A população oscila numa superposição de diferentes frequências características. Aqui temos que $V_0 = 0.02$ hartree, $l_0 = 1400 \text{ \AA}$ , $l_1 = l_3 = 70 \text{ \AA}$ , $l_2 = 100 \text{ \AA}$ . . . . .	61
4.4	Carga no poço quântico central quando a diferença de potencial varia linearmente no tempo desde 0 até 0.01 hartree. Aqui $V_0 = 0.02$ hartree, $l_1 = l_3 = 70 \text{ \AA}$ e $l_2 = 100 \text{ \AA}$ . . . . .	64
4.5	População no gás da esquerda (Preto) e no gás da direita (Vermelho) para as mesmas condições que a figura 4.4. . . . .	65
4.6	Processo de carga no poço quântico central quando está movendo-se sem diferença de potencial aplicada. Apenas uma banda é considerada na simulação. O período do movimento é 20 unidades de tempo. . . . .	68
4.7	Apresentamos aqui a mesma situação da figura 4.6 com a parte Vermelha representando o gás da direita e a parte preta o gás da esquerda. . . . .	69
4.8	Diagrama esquemático dos dois primeiros ciclos descritos anteriormente. . . . .	71
4.9	A população em cada estado do poço quântico central desde 0 até 50 unidades de tempo. . . . .	72



4.10	População em cada estado do gás da direita e do gás da esquerda no tempo. . . . .	73
4.11	População no poço quântico central quando está sujeito a uma diferença de potencial fixa e em movimento harmônico. Aqui temos que $\Delta V = 0.01$ hartree, $V_0 = 0.02$ hartree. O período de oscilação é 50.000 unidades de tempo. . . . .	74
4.12	População nos eletrodos quando temos uma diferença de potencial fixa e o poço quântico central em movimento harmônico. Aqui temos que $\Delta V = 0.01$ hartree, $V_0 = 0.02$ hartree. O período de oscilação é 50.000 unidades de tempo. Em preto temos o gás da esquerda e em vermelho o gás da direita. . .	75



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>21</b>
<b>2</b>	<b>Introdução à Teoria da Matriz Densidade</b>	<b>27</b>
2.1	Operador Densidade e Matriz Densidade . . . . .	27
2.1.1	Ensembles Puro e Misto . . . . .	27
2.1.2	Operador Densidade . . . . .	29
2.1.3	Matriz Densidade . . . . .	31
2.1.4	Populações . . . . .	32
2.1.5	Coerências . . . . .	33
2.2	Propriedades do Operador Densidade . . . . .	33
2.3	Evolução temporal do Operador Densidade: Equação de Liouville-von Neumann . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Estado Estacionário em NEMS: O Modelo</b>	<b>37</b>
3.1	O modelo . . . . .	37
3.2	Elementos matriciais do Hamiltoniano . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Dinâmica de Carga em Sistemas Naoeletro- mecânicos</b>	<b>55</b>
4.1	Dinâmica com diferença de Potencial Dependente do Tempo. . . . .	62
4.2	Dinâmica sem diferença de Potencial com Poço Quântico Central Móvel. . . . .	67
4.3	Poço Quântico Central Móvel com Diferença de Potencial. . . . .	73
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>77</b>

<b>A</b>	<b>Postulados da Mecânica Quântica</b>	<b>81</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>83</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Os dispositivos nanoeletromecânicos (NEMS da sigla em inglês) tem sido objeto de muito interesse há vários anos, e uma diversidade de aplicações tecnológicas, bem como questões puramente científicas têm sido demonstradas. Os NEMS fazem parte da nanotecnologia, cujo início, em seu aspecto teórico, foi estabelecido em 1959 por Richard Feynman em sua conferência “There’s plenty of room at the bottom” [1] ministrada no Instituto Tecnológico de Califórnia. Naquela ocasião, ele disse: “Os princípios da física, tal e como Eu os entendo, não negam a possibilidade para manipular as coisas átomo por átomo”. Desta forma, Feynman fez pública a sua visão de pesquisar na escala atômica porque coisas surpreendentes poderiam acontecer tais como a miniaturização de computadores, manipulação de átomos e construção de máquinas a nível molecular.

Após a conferência de Feynman, foi feito o primeiro dispositivo microeletromecânico por Nathanson et al. [2] da empresa Westinghouse, em 1964. Este dispositivo consistiu em um transistor de comporta ressonante ac-

cionado electrostaticamente. Depois, em 1970, foi inventado o microprocessador que contribuiu nas técnicas de litografia. Estas técnicas representaram um grande impacto sobre os métodos de fabricação de dispositivos microeletromecânicos [3]. Já em 1994, Cleland e Roukes desenvolveram o primeiro dispositivo NEMS ressonante, que consistia de uma viga de silício duplamente incrustada [4].

A maioria dos avanços tecnológicos citados são uma consequência das visões futuristas de Feynman, cuja influência sobre o desenvolvimento de nanotecnologia e NEMS tem sido crucial.

Os NEMS, do ponto de vista prático, podem funcionar como coletores eficientes de energia de vibração ambiente, transformando-a em corrente elétrica quando temos o acoplamento entre a oscilação mecânica do componente oscilante (pode ser uma nanopartícula, um nanopilar tendo no seu topo um material condutor, entre outros) e a carga que está cruzando o dispositivo [5, 6]. O nome de dispositivo nanoeletromecânico (NEMS) é dado devido a esse acoplamento dos graus de liberdade mecânicos e eletrônicos. A assinatura dos efeitos de um elétron sendo transportado em tal dispositivo já foi observada experimentalmente [7–9] como é mostrado na figura 1.1, por exemplo. Nessa figura, a corrente no dispositivo flui através de uma nanopartícula e começa aumentar consideravelmente a partir de uma diferença de potencial adequada.

Por outro lado, do ponto de vista teórico foi estudado o transporte de carga nesse tipo de dispositivos através de diferentes modelos, sendo um dos trabalhos pioneiros o de Gorelik et al. [10]. Nos principais modelos propostos, em geral os graus de liberdade mecânicos foram tratados como sendo

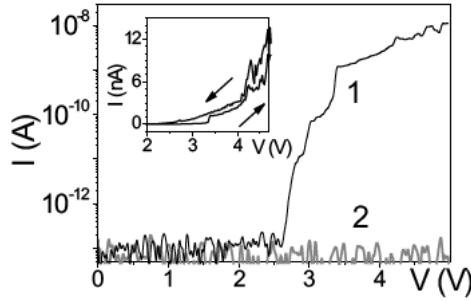


Figura 1.1: Resultado experimental para um dispositivo nanoeletromecânico onde o componente oscilante é uma nanopartícula. A curva 1 é a confirmação de que a corrente flui através da nanopartícula. Se a nanopartícula é removida, o resultado é uma queda na corrente através do dispositivo de várias ordens de grandeza (curva 2). Esta figura foi extraída da referência [7], R. I. Shekhter et al, Versita.

clássicos [11–17] mas há modelos que são híbridos, ou mecanoquânticos [18–20].

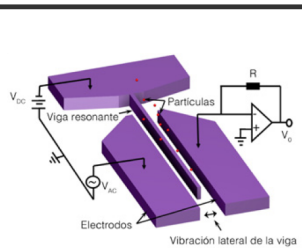


Figura 1.2: Esquema do monitoramento de massa através de um ressonador de silício com vibração lateral. Esta figura foi extraída da referência [28].

Dentre as aplicações de NEMS estão a geração de energia por dispositivos portáteis, entrega de imagem, sensoramento [21]. Exemplos para NEMS compreendem nano-ressonadores [22, 23] e nano-acelerômetro [24] e dispo-

sitivos integrados de detecção piezoresistivos [25],etc. Na figura 1.2, por exemplo, temos um dispositivo nanoeletromecânico usado como um sensor de massa e o qual consiste de um ressonador formado por uma viga incrustada em uma extremidade. Uma mudança na massa do ressonador produz uma alteração em sua frequência de ressonância que pode ser detectada opticamente ou capacitivamente. Os ressonadores podem ser accionados de forma térmica, magnética, piezoelétrica ou eletrostática [26–28]. O princípio da detecção de massa baseia-se no monitoramento da mudança da frequência de ressonância da viga em função da massa absorvida. Yang et al.(2006) [29] desenvolveram um nanosensor de massa que alcançou uma resolução de 7 zeptogramas, o qual é aproximadamente equivalente a 30 átomos de xenônio.

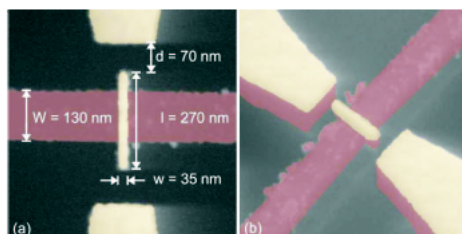


Figura 1.3: (a). Dimensões típicas de um dispositivo nanoeletromecânico. (b). Vista inclinada do componente oscilante entre os eletrodos. Esta figura foi extraída da referência [7].

Nesta dissertação, o sistema nanoeletromecânico que será estudado é composto de apenas um componente oscilante que é inserido entre dois eletrodos metálicos. O componente oscilante tem no seu topo uma camada condutora (quando é um nanopilar por exemplo) ou pode ser também totalmente metálico. O material condutor neste tipo de dispositivo vai servir como



o caminho para o transporte de carga desde um eletrodo até o outro. Na figura 1.3 é mostrado um dispositivo nanoeletromecânico feito de apenas um componente oscilante e é mostrado também as dimensões típicas usadas no dispositivo. O sistema descrito pode ser considerado como um circuito não linear, onde o componente oscilante funciona como um capacitor, e as barreiras de tunelamento entre o componente oscilante e os eletrodos são caracterizadas por uma resistência. Como a distância do componente oscilante com os eletrodos é variável devido à oscilação do mesmo, temos que as barreiras de tunelamento são dependente do tempo. Assim, nas circunstâncias adequadas, pode ocorrer transferência de elétrons entre os componentes do sistema. Um elétron confinado no componente oscilante pode então ser transferido mecanicamente, e ser novamente trocado com outro componente do sistema.

Além do evidente interesse industrial, sob o ponto de vista fundamental o dispositivo descrito acima é evidentemente atrativo, uma vez que envolve uma interessante aplicação da mecânica quântica a sistemas não lineares. Nosso objetivo, neste trabalho é buscar um modelo simples, mas que preserve as características fundamentais de um dispositivo nanoeletromecânico no intuito de melhor compreender como se dá o transporte de carga no sistema.

Assim, o estudo do transporte de carga no dispositivo descrito acima vai ser feito diretamente através da equação de Lioville-von Neumann:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \quad (1.1)$$

onde  $\hat{H}$  é a matriz Hamiltoniana do sistema e  $\hat{\rho}$  é a matriz densidade do sistema. Uma das vantagens de se utilizar esse formalismo está no fato de que

efeitos de temperatura e decoerência podem ser incorporados diretamente, através de operadores adequados. Ainda que não tratemos diretamente desses efeitos nessa dissertação, as bases para tal estarão estabelecidas.

No capítulo 2, faremos uma breve introdução da teoria da matriz densidade, que é a teoria que vai nos permitir o desenvolvimento do trabalho. Aqui, vamos analisar os conceitos de estados puros e mistos, introduzir o operador densidade e demonstrar suas principais propriedades, e avaliar sua evolução temporal. Veremos que com a utilização deste operador, não precisamos conhecer o autovetor do sistema para determinar valores esperados de observáveis. O conceito de coerência também vai ser estudado no final desse capítulo. Uma análise mais detalhada destes tópicos pode ser encontrada em vários livros textos. Citamos, por exemplo, as referências [30–32].

No capítulo 3, o modelo será apresentado e também as aproximações a serem utilizadas. Alguns resultados ilustrativos de como o sistema se comporta na configuração estacionária serão discutidos também.

No capítulo 4, estudaremos a dinâmica de carga do sistema a partir da equação de Lioville-von Neumann como já foi dito, usando as bases teóricas do capítulo 2 e o modelo que foi desenvolvido no capítulo 3.

No capítulo 5, finalizaremos a dissertação com as conclusões e perspectivas.

# Capítulo 2

## Introdução à Teoria da Matriz Densidade

Na mecânica quântica o estado do sistema não é, em geral, perfeitamente conhecido. Portanto, vamos ver como podemos incorporar ao formalismo a informação incompleta que possuímos sobre o estado do sistema. Para fazer isso, nos tópicos a seguir deste capítulo, vamos estudar como usar uma ferramenta valiosa, o operador densidade  $\hat{\rho}$ , que combina a aplicação dos postulados da mecânica quântica com aqueles provenientes da mecânica estatística. Os artigos [33, 34] são boas referências sobre o assunto.

Por meio dessa teoria, seremos capazes de discutir a dinâmica eletrônica em um sistema nanoeletromecânico.

### 2.1 Operador Densidade e Matriz Densidade

#### 2.1.1 Ensembles Puro e Misto

Os postulados básicos da mecânica quântica (Ver apêndice 1), na verdade permitem descrever sistemas fechados (ou ensembles puros) nos quais

o estado do sistema é completamente conhecido. Para esses sistemas, o autovetor pode ser representado por uma superposição linear de estados:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |n\rangle, \quad (2.1)$$

com

$$\sum_n |C_n(t)|^2 = 1, \quad (2.2)$$

onde  $|n\rangle$  representa uma base ortonormal pertencente ao espaço de Hilbert. Nesta descrição afirmamos que o sistema tem probabilidade  $|C_n(t)|^2$  de se encontrar no estado  $|n\rangle$ .

Por outro lado, temos situações nas quais o ensemble a ser estudado é uma coleção de sistemas e para o qual não é possível encontrar um autovetor que represente o ensemble como um todo. Nesses casos podemos apenas associar certas probabilidades  $p_1, p_2, \dots, p_n$ , de que um particular sistema do ensemble, escolhido aleatoriamente, esteja nos estados quânticos descritos pelos autovetores  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ , respectivamente. Um ensemble desse tipo é chamado de ensemble misto (ou sistema aberto). Nesses ensembles, então, o estado não pode ser representado por uma superposição linear como o caso do ensemble puro (equação 2.1) e tampouco podemos, a priori, afirmar que os estados são ortogonais, mas podemos supor que eles são normalizados ( $\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1$ ). Embora, como no caso de ensembles puros, temos que para ensembles mistos, as probabilidades  $p_n$  devem satisfazer

$$p_n \geq 0 \quad (2.3)$$

e

$$\sum_n p_n = 1. \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Operador Densidade

Tendo definidos os conceitos de ensembles puros e mistos podemos agora, fazendo uso do postulado IV da mecânica quântica (Ver apêndice 1), obter a probabilidade de que a medida no ensemble forneça o resultado  $a$  como sendo:

$$p_a = \sum_n p_n \langle \varphi_n | a \rangle \langle a | \varphi_n \rangle \quad (2.5)$$

$$= \sum_n p_n \text{Tr}(|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \hat{P}_a) \quad (2.6)$$

$$= \text{Tr} \left[ \left( \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right) \hat{P}_a \right] \quad (2.7)$$

onde  $\hat{P}_a = |a\rangle \langle a|$  representa o operador de projeção associado ao autovetor  $|a\rangle$ . Para chegar na equação 2.7 foi usado a propriedade do traço  $\text{Tr}|a\rangle \langle b| = \langle b|a\rangle$ .

Na expressão entre parênteses da equação 2.7 temos um operador que nos permite caracterizar o estado quântico do sistema; ou seja, este operador permite a obtenção de todas as previsões físicas que podem ser calculadas conhecendo-se  $|\varphi_n\rangle$ . Esse operador é definido como sendo o operador densidade:

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (2.8)$$

Usando a definição do operador densidade dada pela expressão 2.8, temos que a probabilidade de que a medida de  $\hat{A}$  no ensemble forneça o resultado  $a$

pode agora ser escrita em termos desse operador:

$$p_a = \text{Tr}(\hat{\rho} P_a) \quad (2.9)$$

E para o valor esperado de  $\hat{A}$  temos que:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_a a p_a \quad (2.10)$$

$$= \sum_a a \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_a) \quad (2.11)$$

$$= \text{Tr} \left( \sum_a a \hat{\rho} \hat{P}_a \right) \quad (2.12)$$

$$= \text{Tr} \hat{\rho} \left( \sum_a a \hat{P}_a \right). \quad (2.13)$$

Mas a parte entre parênteses da última expressão de acima é simplesmente a decomposição espectral do observável  $\hat{A}$ . Portanto, a forma final do valor esperado de  $\hat{A}$  em termos do operador densidade fica na forma a seguir:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A} \quad (2.14)$$

A expressão acima na verdade é definida para descrever uma mistura estatística de estados (ensemble misto). Agora, das expressões já obtidas para um ensemble misto podemos obter expressões que descrevem um ensemble puro. Por exemplo, se fizermos  $p_n = 1$  para  $|\varphi_n\rangle = |\varphi\rangle$  e  $p_n = 0$  para todos os outros autovetores  $|\varphi_n\rangle$ . Portanto, levando em conta essas condições, temos que para um ensemble puro o operador densidade da equação 2.8 é agora escrito na forma:

$$\hat{\rho} = |\varphi\rangle \langle \varphi| \quad (2.15)$$

e a probabilidade pode ser agora escrita como:

$$p_a = \langle \varphi | \hat{P}_a | \varphi \rangle \quad (2.16)$$

e o valor médio como:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle, \quad (2.17)$$

o qual está de acordo com os postulados básicos da mecânica quântica.

### 2.1.3 Matriz Densidade

Tendo já definido o operador densidade (equação 2.8), vamos agora encontrar como é sua representação matricial, denominada de matriz densidade. Na base  $|\{\psi_k\}\rangle$  ele pode-se representar da forma a seguir:

$$\hat{\rho} = \sum_k \sum_j |\psi_k\rangle \langle \psi_k | \hat{\rho} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \quad (2.18)$$

$$= \sum_k \sum_j \rho_{kj} |\psi_k\rangle \langle \psi_j|, \quad (2.19)$$

onde os coeficientes  $\rho_{kj}$  vão vir a representar os elementos de matriz do operador densidade, e são dados de acordo a equação 2.18 por:

$$\rho_{kj} = \langle \psi_k | \hat{\rho} | \psi_j \rangle \quad (2.20)$$

$$= \sum_n p_n \langle \psi_k | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi_j \rangle \quad (2.21)$$

$$= \sum_n p_n \langle \psi_k | \varphi_n \rangle \langle \psi_j | \varphi_n \rangle^* \quad (2.22)$$

E a probabilidade fica agora escrita em termos de  $\rho_{kj}$  como:

$$p_a = \sum_n p_n \langle \varphi_n | \hat{P}_a | \varphi_n \rangle \quad (2.23)$$

$$= \sum_n \sum_{kj} p_n \langle \varphi_n | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \hat{P}_a | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \varphi_n \rangle \quad (2.24)$$

$$= \sum_{kj} \rho_{kj} \langle \psi_j | \hat{P}_a | \psi_k \rangle \quad (2.25)$$

Então,  $\rho_{kj}$  é interpretado como a probabilidade com que elementos da matriz  $\langle \psi_j | \hat{P}_a | \psi_k \rangle$  contribuam com o valor de  $p_a$ .

### 2.1.4 Populações

Vamos agora interpretar o que são os elementos diagonais da matriz densidade  $\rho_{kk}$ . Da equação 2.22 temos que esses elementos são dados pela seguinte expressão:

$$\rho_{kk} = \sum_n p_n \langle \psi_k | \varphi_n \rangle \langle \psi_k | \varphi_n \rangle^* \quad (2.26)$$

$$= \sum_n p_n |\langle \psi_k | \varphi_n \rangle|^2 \quad (2.27)$$

$$= \sum_n p_n |c_k^{(n)}|^2, \quad (2.28)$$

onde  $|c_k^{(n)}|^2$  é um número positivo, o qual pode ser interpretado da seguinte maneira: se o estado do sistema é  $|\varphi_n\rangle$ ,  $|c_k^{(n)}|^2$  vai ser a probabilidade de encontrar, em uma medida, o sistema no estado  $|\psi_k\rangle$ . De acordo com a equação 2.28, se levarmos em conta a indeterminância de um estado antes de uma medida,  $\rho_{kk}$  representa a probabilidade média de encontrar o sistema no estado  $|\psi_k\rangle$ . Então, chamaremos  $\rho_{kk}$  de população do estado  $|\psi_k\rangle$ . Se fizermos N



vezes a mesma medida, com  $N$  sendo um número grande, temos que  $N\rho_{kk}$  sistemas serão encontrados no estado  $|\psi_k\rangle$ . Se todos os  $|c_k^{(n)}|^2$  forem nulos vamos ter que  $\rho_{kk}$  também o será.

### 2.1.5 Coerências

Fazendo agora a interpretação dos elementos não diagonais da matriz densidade  $\rho_{kj}$ . Da equação 2.22 esses elementos são dados por:

$$\rho_{kj} = \sum_n p_n \langle \psi_k | \phi_n \rangle \langle \psi_j | \phi_n \rangle^* \quad (2.29)$$

$$= \sum_n p_n c_k^{(n)} c_j^{(n)*} \quad (2.30)$$

onde  $c_k^{(n)} c_j^{(n)*}$  vem a expressar os efeitos de interferência entre os estados  $|\psi_k\rangle$  e  $|\psi_j\rangle$ , os quais podem surgir quando o estado  $|\phi_n\rangle$  é uma superposição linear de estados.

## 2.2 Propriedades do Operador Densidade

Se o operador que descreve determinado sistema físico é o operador densidade  $\hat{\rho}$ , então ele necessariamente deve satisfazer as seguintes propriedades:

1.  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ , Hermiticidade
2.  $\text{tr} \hat{\rho} = 1$ , Unicidade do traço
3.  $\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle \geq 0$ , Não-negatividade

Da definição do operador densidade (equação 2.8), pode-se mostrar

cada uma das propriedades anteriores do operador  $\hat{\rho}$ :

$$\hat{\rho}^\dagger = \left( \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \right)^\dagger \quad (2.31)$$

$$= \sum_n p_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (2.32)$$

$$= \hat{\rho}. \quad (2.33)$$

onde foi usado o fato das probabilidades  $p_n$  serem números reais.

Para a segunda propriedade temos que:

$$\text{tr} \hat{\rho} = \sum_n p_n \text{tr} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (2.34)$$

$$= \sum_n p_n \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1. \quad (2.35)$$

onde foi usado a normalização das probabilidades (equação 2.4) e dos auto-vetores  $\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 1$ .

Para a terceira propriedade vemos que:

$$\langle \varphi | \hat{\rho} | \varphi \rangle = \sum_n p_n \langle \varphi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \varphi \rangle \quad (2.36)$$

$$= \sum_n p_n |\langle \varphi | \varphi_n \rangle|^2 \geq 0. \quad (2.37)$$

onde foi usado o fato das probabilidades  $p_n$  serem não negativas.

As anteriores são as propriedades gerais do operador densidade. Por outro lado, para um ensemble puro temos também que:  $\rho^2 = \hat{\rho}$  e  $\text{tr} \rho^2 = 1$  uma vez que  $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ . Para um ensemble misto, a relação é  $\text{tr} \rho^2 < 1$  para  $p_n \neq 0$ .

## 2.3 Evolução temporal do Operador Densidade:

### Equação de Liouville-von Neumann

A partir da definição do operador densidade (equação 2.8), podemos obter sua evolução temporal:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_n p_n |\varphi_n(t)\rangle \langle \varphi_n(t)| \right)$$

ou

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \sum_n p_n \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(t)\rangle \right) \langle \varphi_n(t)| + |\varphi_n(t)\rangle \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \varphi_n(t)| \right) \right] \quad (2.38)$$

Usando agora a equação de Schrödinger, (ver apêndice 1),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(t)\rangle = \hat{H} |\varphi_n(t)\rangle. \quad (2.39)$$

Podemos escrever

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \varphi_n(t)| = \langle \varphi_n(t)| \hat{H}, \quad (2.40)$$

uma vez que  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ .

Fazendo uso das equações 2.39 e 2.40, a equação 2.38 fica agora da forma seguinte:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \sum_n p_n \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\varphi_n(t)\rangle \langle \varphi_n(t)| + |\varphi_n(t)\rangle \frac{i}{\hbar} \langle \varphi_n(t)| \hat{H} \right] \quad (2.41)$$

Então:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (2.42)$$

que é a chamada equação de Liouville-von Neumann e descreve a evolução temporal do operador densidade na representação de Schrödinger. Ela é válida também para hamiltonianos dependentes do tempo.

A solução da equação 2.42 pode ser escrita como:

$$|\varphi_n(t)\rangle = U(t, t_0) |\varphi_n(t_0)\rangle, \quad (2.43)$$

com  $U(t, t_0)$  sendo o operador evolução temporal do sistema. No instante  $t$  então o operador densidade fica da forma a seguir:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_n p_n |\varphi_n(t)\rangle \langle \varphi_n(t)| \quad (2.44)$$

$$= \sum_n p_n U(t, t_0) |\varphi_n(t_0)\rangle \langle \varphi_n(t_0)| U^\dagger(t, t_0) \quad (2.45)$$

$$= U(t, t_0) \left( \sum_n p_n |\varphi_n(t_0)\rangle \langle \varphi_n(t_0)| \right) U^\dagger(t, t_0) \quad (2.46)$$

onde a parte entre parênteses vem a representar o operador densidade no tempo  $t_0$ . Então, a solução geral da equação de Liouville-von Neumann (equação 2.42) vai ser expressa como:

$$\hat{\rho}(t) = U(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) U^\dagger(t, t_0) \quad (2.47)$$

# Capítulo 3

## Estado Estacionário em NEMS: O Modelo

No capítulo 2 foi apresentada a teoria que vai nos servir para o estudo da dinâmica de carga em dispositivos nanoeletromecânicos. O estudo dessa dinâmica será desenvolvido no capítulo 4, mas antes disso devemos analisar e desenvolver o modelo que representa esse tipo de dispositivo. Pretendemos, no presente capítulo, mostrar como esse sistema, objeto do estudo, se comporta na configuração estacionária, ou seja, pretendemos determinar como são suas densidades de estados e autofunções na condição independente do tempo.

### 3.1 O modelo

Um exemplo de sistema físico real é o mostrado na figura 3.1. Ele é um sistema composto por um componente oscilante (pode ser uma nanopartícula condutora, um pilar contendo no seu topo um material condutor, uma barra metálica, entre outros) que é inserido entre dois eletrodos que se encontram

a uma diferença de potencial  $\Delta V$ . No topo do componente oscilante, temos uma camada de um condutor que serve como o caminho para o transporte de carga desde um eletrodo até o outro. Neste tipo de sistema, em geral, ocorre um acoplamento entre a corrente elétrica que cruza o dispositivo e a vibração mecânica do componente oscilante. A rigor, o termo *nanoeletromecânico* se refere a dispositivos onde está presente esse acoplamento elétrico-mecânico.

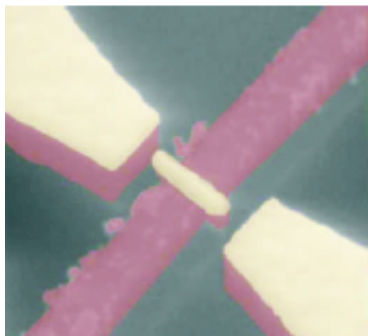


Figura 3.1: Dispositivo Nanoeletromecânico contendo apenas um componente oscilante. A parte amarela (incluindo os eletrodos) representa o material condutor e serve como o caminho para o transporte de carga. Esta figura foi extraída da referência [7], R. I. Shekhter et al, Versita.

Apesar do sistema mostrado acima ser bidimensional, podemos considerar que apenas a coordenada paralela ao dispositivo é relevante para o transporte de carga. A coordenada perpendicular contribuiria, em boa aproximação, apenas com termos de degenerescência no espectro do sistema estacionário. Podemos então formular um modelo unidimensional para o problema que acreditamos preservar a física fundamental do dispositivo. No modelo abaixo, apenas um componente oscilante será considerado, sendo que a introdução de um segundo apenas complexifica os cálculos sob o ponto de vista analítico, e

aumenta o tempo computacional necessário para se resolver a equação transcendental característica desse tipo de modelo. Ou seja, a idéia básica apresentada a seguir nesse capítulo pode ser extrapolada para um número qualquer de componentes oscilantes, desde que tenhamos capacidade e precisão computacional suficientes.

Assim, vamos modelar o sistema considerando os eletrodos como sendo gases de elétrons finitos de comprimento  $l_0$  que obedecem à distribuição de Fermi-Dirac [35]. As regiões entre o gás da esquerda e o componente oscilante e entre o objeto oscilante e o gás da direita podem ser consideradas como barreiras de potencial de comprimento  $l_1$  e  $l_3$  e potenciais elétricos  $V_1$  e  $V_3$  respectivamente. Por último, o componente oscilante pode ser modelado como um poço de potencial <sup>1</sup> de comprimento  $l_2$  e potencial  $V_2$ . Na figura 3.2 (a) mostra-se um esquema para o caso quando  $\Delta V = 0$  (caso simétrico) e na figura 3.2 (b) temos a situação quando aplicarmos uma diferença de potencial entre os eletrodos, ou seja,  $\Delta V \neq 0$  (caso assimétrico).

Para iniciarmos o estudo, primeiro faremos o tratamento estacionário desse sistema e no próximo capítulo o tratamento dinâmico que é a situação física de interesse. Ao fazermos a diferença de potencial ou a largura das barreiras mudarem com o tempo, teremos como estudar as condições pelas quais o transporte de carga é dado em um dispositivo cuja estrutura evolui dinamicamente. Agora, para fazer o tratamento estacionário do sistema descrito acima, precisamos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo

---

<sup>1</sup> Ao longo desta dissertação chamaremos o componente oscilante de "poço quântico central" para distingui-lo dos eletrodos que são também poços mesmo que no modelo sejam chamados de gases de elétrons. Outras denominações que são usadas para para o componente oscilante são "componente central" e "centro da estrutura".

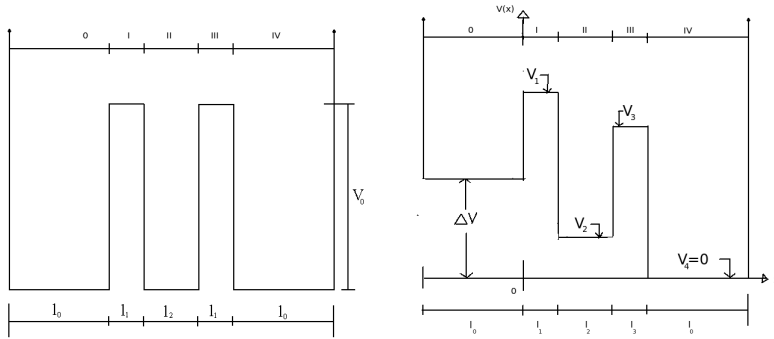


Figura 3.2: (a).Modelo de poços e barreiras de potencial para o dispositivo nanoeletromecânico da figura 3.1 para o caso quando  $\Delta V = 0$ .  $V_0$  é a altura das barreiras. (b).Caso para quando  $\Delta V \neq 0$ .  $\Delta V$  é a diferença de potencial entre os eletrodos (o eletrodo da direita tem um potencial  $V_4 = 0$ );  $V_1$  é o potencial na primeira barreira;  $V_2$  é o potencial no poço quântico central e  $V_3$  é o potencial na segunda barreira. A origem do sistema está no começo da primeira barreira.

(não-relativista) <sup>2</sup>,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_i(x)}{dx^2} + V(x) \Psi_i(x) = E \Psi_i(x), \quad (3.1)$$

a qual vai nos fornecer as autofunções e autoenergias do sistema. Na figura 3.2(b), podemos observar que a representação matemática (modelo de poços) do sistema físico real foi dividida em regiões dadas segundo a figura por 0 (gás da esquerda), I(primeira barreira de potencial), II(poço quântico central), III(segunda barreira de potencial) e IV(gás da direita).

Então, resolvendo a equação de Schrödinger (equação 3.1) para cada região temos que:

<sup>2</sup>Em todas as simulações desta dissertação foram usadas unidades atômicas de tal forma que  $\hbar = 1, m = 1$ .



(a) Para a região 0,  $V(x) = \Delta V$  e  $i = 0$ , e as soluções possíveis dependendo da energia com que incide a partícula são:

$$\Psi_0(x) = a_0 \cos(k_0 x) + b_0 \sin(k_0 x) \quad (3.2)$$

quando  $E > \Delta V$ , com  $k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - \Delta V)}$ .

e

$$\Psi_0 = a_0 e^{k_0 x} + b_0 e^{-k_0 x} \quad (3.3)$$

para  $E < \Delta V$  e  $k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(\Delta V - E)}$ .

(b) Na região I,  $V(x) = V_1$  e  $i = I$ , e então teremos as seguintes soluções:

$$\Psi_I(x) = a_1 \cos(k_1 x) + b_1 \sin(k_1 x) \quad (3.4)$$

para quando  $E > V_1$  e  $k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1)}$

e

$$\Psi_I(x) = a_1 e^{k_1 x} + b_1 e^{-k_1 x} \quad (3.5)$$

quando  $E < V_1$  e  $k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)}$ .

(c) Para a região II, temos que  $V(x) = V_2$  e  $i = II$ , e portanto vamos ter que as soluções da equação 3.1 são da forma:

$$\Psi_{II}(x) = a_2 \cos(k_2 x) + b_2 \sin(k_2 x) \quad (3.6)$$

quando  $E > V_2$  e  $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2)}$

e

$$\Psi_{II}(x) = a_2 e^{k_2 x} + b_2 e^{-k_2 x} \quad (3.7)$$

para  $E < V_2$  e  $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - E)}$ .

(d) Para a região III,  $V(x) = V_3$  e  $i = III$ , e então as soluções da equação 3.1 são as seguintes:

$$\Psi_{III}(x) = a_3 \cos(k_3 x) + b_3 \sin(k_3 x) \quad (3.8)$$

quando temos  $E > V_3$  e  $k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_3)}$

e

$$\Psi_{III}(x) = a_3 e^{k_3 x} + b_3 e^{-k_3 x} \quad (3.9)$$

para  $E < V_3$  e  $k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_3 - E)}$ .

(e) Para a região IV,  $V(x) = V_4 = 0$  e  $i = IV$ , e portanto a equação de Schrödinger (equação 3.1) tem a solução seguinte:

$$\Psi_{IV}(x) = a_4 \cos(k_4 x) + b_4 \sin(k_4 x) \quad (3.10)$$

com  $k_4 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ .

Nas soluções da equação de Schrödinger, os  $k_m$  com  $m = 0, 1, 2, 3, 4$  representam os vetores de onda de cada região respectivamente, e  $a_j$  e  $b_j$  com  $j = 0, 1, 2, 3, 4$  são as amplitudes dessas funções que são constantes a determinar.

Nas fronteiras da figura 3.2, as autofunções e suas derivadas devem ser contínuas e unívocas, o que se expressa da seguinte maneira:

$$(1). \Psi_0(-l_0) = 0$$

$$(2). \Psi_0(0) = \Psi_I(0)$$

$$(3). \left(\frac{d\Psi_0}{dx}\right)|_{x=0} = \left(\frac{d\Psi_I}{dx}\right)|_{x=0}$$

$$(4). \Psi_I(l_1) = \Psi_{II}(l_1)$$

$$(5). \left(\frac{d\Psi_I}{dx}\right)|_{x=l_1} = \left(\frac{d\Psi_{II}}{dx}\right)|_{x=l_1}$$

$$(6). \Psi_{II}(l_4) = \Psi_{III}(l_4)$$

$$(7). \left(\frac{d\Psi_{II}}{dx}\right)|_{x=l_4} = \left(\frac{d\Psi_{III}}{dx}\right)|_{x=l_4}$$

$$(8). \Psi_{III}(l_5) = \Psi_{IV}(l_5)$$

$$(9). \left(\frac{d\Psi_{III}}{dx}\right)|_{x=l_5} = \left(\frac{d\Psi_{IV}}{dx}\right)|_{x=l_5}$$

$$(10). \Psi_{IV}(l_6) = 0.$$

Nas condições de contorno anteriores foram definidos os seguintes parâmetros:

$$l_4 = l_1 + l_2 \tag{3.11}$$

$$l_5 = l_4 + l_3 \tag{3.12}$$

$$l_6 = l_5 + l_0 \tag{3.13}$$

Por último, ao avaliar as condições de contorno dadas acima vamos ter duas equações para cada uma delas menos na condição (10) da qual teremos só uma equação. Agora, esse conjunto de equações vai nos levar à seguinte

matriz:

$$\hat{H}_{ij} = \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C & D & -E & -F & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ G & H & -I & -J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K & L & -M & -N & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & O & P & -Q & -R & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S & T & -U & -V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X & Z & -Y & -W & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & -\gamma & -\Delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \eta & \Theta & -\Phi & -\Psi \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & \vartheta \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

onde cada elemento dessa matriz são constantes que foram introduzidas ao avaliar essas condições de contorno e elas são simplesmente funções avaliadas nos pontos  $x = -l_0, x = 0, x = l_1, x = l_4, x = l_5$  e  $x = l_6$ .  $\hat{H}_{ij}$  vai representar então o Hamiltoniano do sistema como um todo (sem particionar). Cabe salientar que cada constante dessa matriz vai ter dois valores dependendo de como é a energia da partícula incidente. Só os elementos que representam a última região (região IV) vão ter só um valor pois nessa região  $V(x) = 0$ .

Fazendo operações elementares na matriz  $\hat{H}_{ij}$  (equação 3.14), fica agora expressa na forma seguinte:

$$\hat{H}_{ij} = \begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \forall & -E & -F & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Xi & -M & -N & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_1 & c_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_3 & -U & -V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_5 & c_6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_7 & -\gamma & -\Delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_9 & c_{10} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{11} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

e portanto, o espectro de energia do sistema vai ser dado através da solução da seguinte expressão:

$$\det(\hat{H}_{ij}) = 0 \quad (3.16)$$

Esta é a única equação que não admite solução analítica no modelo, pois a condição acima conduz a uma complexa equação transcendental que, no entanto, pode ser resolvida numericamente com bom grau de precisão.

A partir da equação 3.15 podemos estabelecer as relações que vão nos permitir encontrar cada um dos coeficientes das funções bases dadas pelas equações 3.2-3.10:

$$b_4 = 1,$$

$$a_4 c_9 + c_{10} = 0,$$

$$b_3 c_7 - a_4 \gamma - \Delta = 0,$$

$$a_3 c_5 + b_3 c_6 = 0,$$

$$b_2c_3 - a_3U - b_3V = 0,$$

$$a_2c_1 + b_2c_2 = 0,$$

$$b_1\Xi - a_2M - b_2N = 0,$$

$$a_1\rho + b_1\Lambda = 0,$$

$$b_0\forall - a_1E - b_1F = 0,$$

$$a_0A + b_0B = 0.$$

Portanto, das equações anteriores, os coeficientes vão ser dados por:

$$a_0 = -\frac{b_0B}{A}; \quad b_0 = \frac{a_1E+b_1F}{\forall}; \quad a_1 = -\frac{b_1\Lambda}{\rho}; \quad b_1 = \frac{a_2M+b_2N}{\Xi}; \quad a_2 = -\frac{b_2c_2}{c_1}; \quad b_2 = \frac{a_3U+b_3V}{c_3}; \quad a_3 = -\frac{b_3c_6}{c_5}; \quad b_3 = \frac{a_4\gamma+\Delta}{c_7}; \quad a_4 = -\frac{c_{10}}{c_9}; \quad b_4 = 1.$$

Nas figuras abaixo, apresentamos alguns resultados ilustrativos de como são as autofunções estacionárias do sistema modelado acima. O poço quântico central tem 100 angströms de largura. Na figura 3.3 apresentamos um tipo de autofunção que está localizada basicamente nos eletrodos. É fácil perceber que a densidade de probabilidade no interior do poço quântico central é basicamente nula, sendo a distribuição de probabilidade localizada fundamentalmente nos gases de elétrons. Mostramos apenas duas, mas, evidentemente, se a dimensão dos poços que representam os eletrodos for suficientemente grande, existem milhares de soluções desse tipo. A origem dessas soluções, que tem densidade de probabilidade muito baixa no poço quântico central, é fácil de ser entendida. Se pensarmos num único poço quântico isolado, seu espectro é discreto, com energias bem definidas. Qualquer energia diferente das autoenergias do poço não admite soluções estacionárias. Assim, quando as autoenergias do sistema são muito diferentes daquelas que seriam as autoenergias do poço quântico isolado, o estado só pode ser localizado

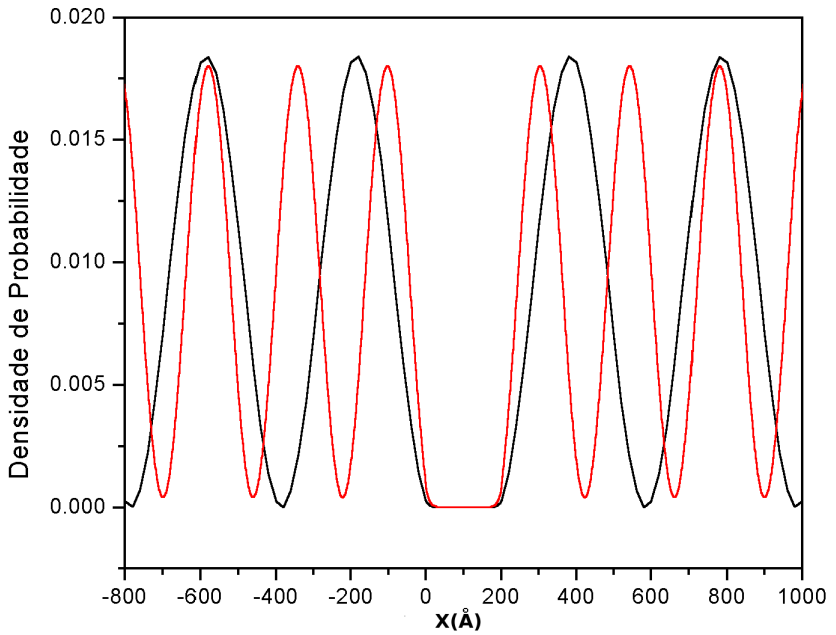


Figura 3.3: Densidade de probabilidade do sistema como um todo considerando dois estados. Como vemos, a densidade do poço quântico central é nula, e portanto temos que a distribuição de probabilidade está localizada fundamentalmente nos gases. Aqui temos  $l_1 = l_3 = 50 \text{ Å}$  e  $l_2 = 100 \text{ Å}$ .

fora do poço. Para essas energias, como veremos posteriormente, há uma baixa probabilidade de ocupação de uma partícula no componente central, e, como consequência, partículas que ocupem estes estados pouco contribuirão no processo de transferência de carga dinâmico.

A figura 3.4, ao contrário, apresenta autofunções localizadas fundamentalmente no poço quântico central. Mostramos, por clareza, apenas duas mas existe uma família dessas funções, com amplitudes diferentes como visto na figura 3.5. Uma do tipo  $1s$  ou seja, sem nenhum nó, outra do tipo  $p$ , com

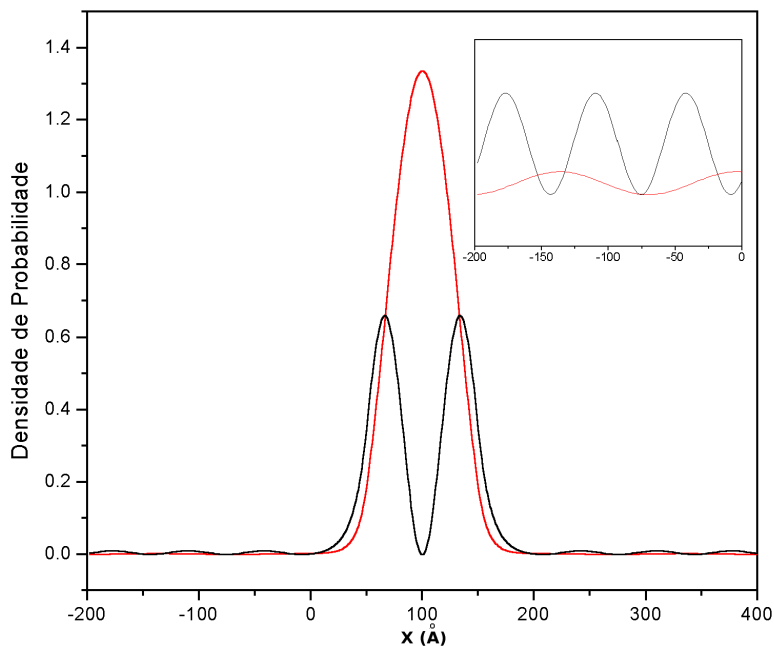


Figura 3.4: Densidade de probabilidade do sistema como um todo localizada basicamente no poço quântico central.

um nó. Essas são funções basicamente do poço quântico central, e as autoenergias correspondentes a elas são aquelas que irão formar as bandas de energia do poço quântico. Vale lembrar que, se o poço quântico central estivesse isolado, haveria apenas uma função tipo  $1s$  possível (aquela correspondente ao primeiro estado permitido do poço quântico), apenas uma  $1p$  correspondente ao segundo estado e assim por diante. Assim, a existência dos dois eletrodos considerados aqui como finitos descreve, de maneira muito conveniente, o espectro de um poço quântico central que está acoplado ao meio externo contínuo. A convergência dessa aproximação será discutida no



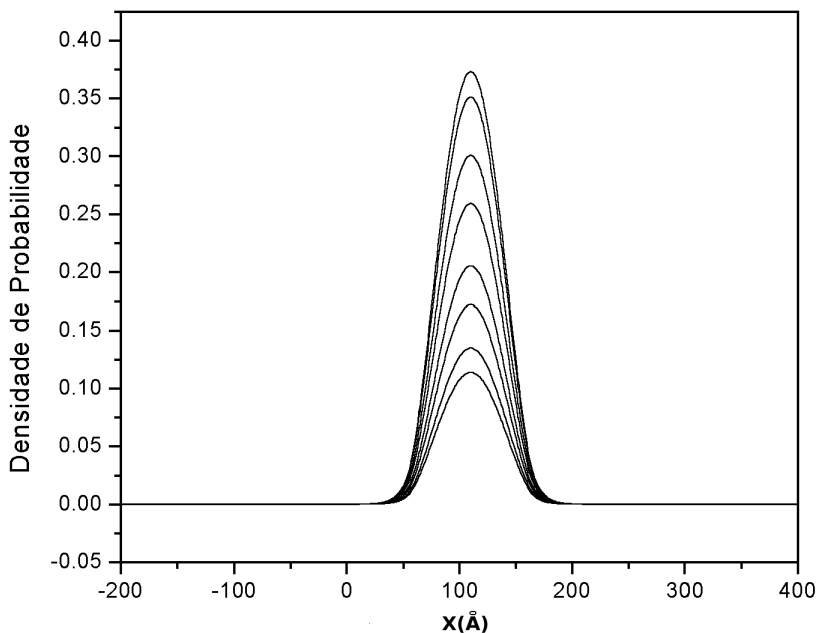


Figura 3.5: Densidade de probabilidade para o mesmo caso da figura 3.4 mas incluindo mais autofunções.

próximo capítulo.

Na figura 3.5, mostramos uma família de funções localizadas no poço quântico central. Na medida em que aumentamos o comprimento dos eletrodos, o número dessas funções aumenta, o espaçamento em energia diminui e forma-se o que chamamos de banda de energia. Notemos que um poço isolado teria apenas um nível de energia discreto, e em um poço quântico acoplado a um contínuo teríamos infinitas dessas funções, com diferença de energia entre elas nula, mas dentro de uma faixa de energia que determinaria a largura da banda. Em resumo, o surgimento dessa família finita de estados

é decorrência do acoplamento entre poço e gases de elétrons discretos.

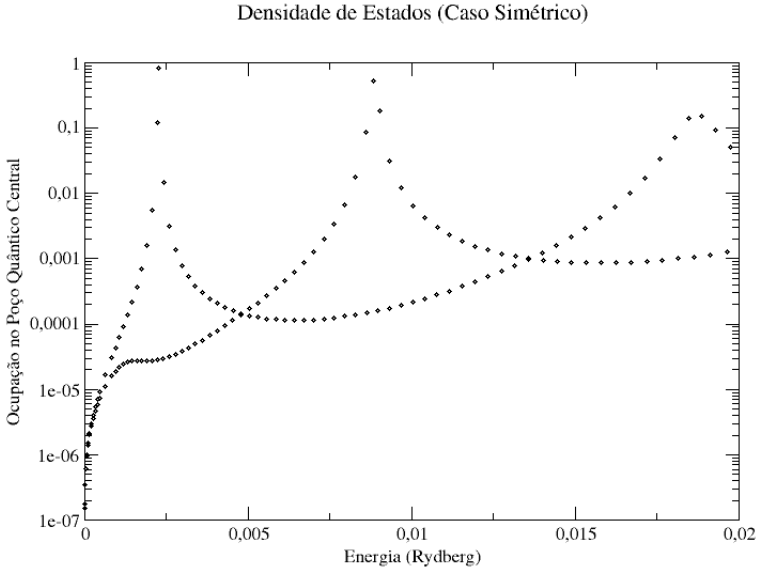


Figura 3.6: Densidade de estados para  $l_0 = 3350 \text{ \AA}$ ;  $l_2 = 100 \text{ \AA}$ ;  $\Delta V = 0$  e  $V_0 = 0,020 \text{ hartree}$ .

Para reforçar essa idéia, apresentamos na figura 3.6 a população no poço quântico central, para cada autoestado. Para calcularmos a população basta integrarmos as autofunções na região espacial onde está definido o poço quântico central. As condições de cálculo realizadas permitem a formação de 3 bandas e o sistema é simétrico. Como dito, nessa figura, cada ponto representa um autoestado estacionário do sistema. Os estados com baixa ocupação, que formam a linha inferior, são aqueles pertencentes aos eletrodos. Os estados com maior ocupação, formam as bandas de energia do poço quântico central. Notemos que com esse modelo podemos determinar a largura e assi-

metria na forma das bandas.

Sob um ponto de vista fenomenológico, podemos dizer que quanto mais estreita é uma banda, menor será a probabilidade de tunelamento de uma partícula do eletrodo para ela. Isso porque bandas muito estreitas surgem devido a existência de estados muito localizados, e quanto maior a localização, menor a superposição entre as autofunções do poço quântico central e dos eletrodos. Assim, num processo dinâmico, a figura de densidade de estados nos indica que a banda de maior energia, seria a que mais rapidamente ficaria ocupada no poço quântico central. No entanto, quando quebramos a simetria do sistema através da modificação da distância entre o componente central e eletrodos ou pela aplicação de uma diferença de potencial, outros efeitos podem surgir, e o sistema torna-se muito mais complexo.

Para finalizar, na figura 3.7 mostramos o mesmo cálculo mas para um sistema assimétrico. Nesse caso, as duas barreiras de tunelamento têm larguras diferentes, o que acarreta uma reorganização na estrutura de bandas. Como será visto no capítulo 4, essa reorganização é crucial para entendermos aspectos da dinâmica de carga no dispositivo.

### Densidade de Estados (Caso Assimétrico)

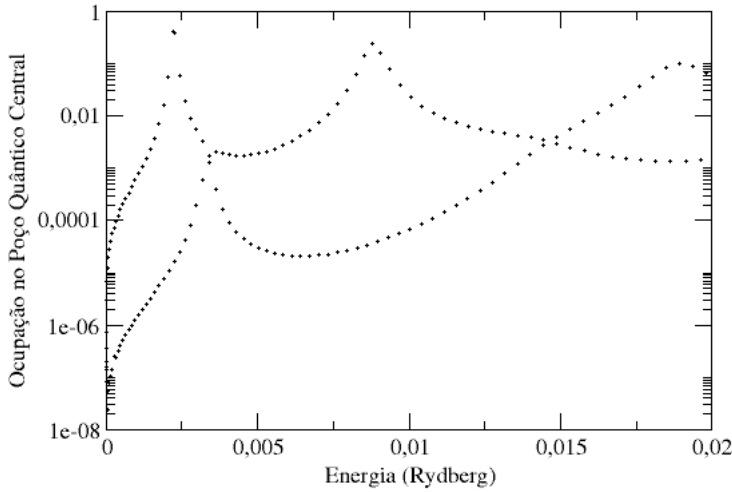


Figura 3.7: Caso assimétrico da densidade de estados da figura 3.6 com  $l_1 = 60 \text{ \AA}$  e  $l_3 = 20 \text{ \AA}$ .

## 3.2 Elementos matriciais do Hamiltoniano

A solução da equação de Schrödinger apresentada acima nos permite determinar o espectro do sistema modelado anteriormente bem como as autofunções de todos os estados. Como o modelo é fechado numa caixa, esse espectro é discreto, e o número de autoestados será definido pelo comprimento total dos eletrodos. Como esse comprimento é arbitrário, podemos nos aproximar tanto do contínuo quanto for necessário. Uma análise desse ponto será apresentada no próximo capítulo.

A rigor, nosso objetivo não é encontrar as soluções estacionárias do

sistema, mas sim, determinar um operador hamiltoniano modelo que permita resolver a equação de Liouville-von-Neumann sob condições não estacionárias do dispositivo. Assim, a solução da equação de Schrödinger apresentada anteriormente é apenas um passo intermediário na solução do problema. O que faremos será utilizar as autofunções resolvidas acima como bases para construção de uma matriz hamiltoniana que conterà as informações de cada um dos componentes do dispositivo nanoeletromecânico de maneira separada.

Para tal, iremos particionar o sistema em cinco componentes, sendo que o hamiltoniano total será escrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_E + \hat{H}_{EC} + \hat{H}_C + \hat{H}_{CD} + \hat{H}_D \quad (3.17)$$

Onde  $\hat{H}_E$  representa o hamiltoniano do gás da esquerda,  $\hat{H}_{EC}$  representa o hamiltoniano de interação entre o gás da esquerda e o ponto quântico,  $\hat{H}_C$  é o hamiltoniano no poço quântico central,  $\hat{H}_{CD}$  é o hamiltoniano de interação entre o poço quântico central e o gás da direita e  $\hat{H}_D$  vai ser o hamiltoniano no gás da direita. Como vemos, não foi considerado um hamiltoniano de interação entre os gases pois a interação entre eles pode ser considerada fraca. Então, os elementos de matriz para cada componente serão dados pelas expressões seguintes:

$$\langle \Psi_j | \hat{H}_\beta | \Psi_i \rangle = \int_\beta \Psi_j^* \left( -\frac{d}{dx^2} + V(x) \right) \Psi_i dx \quad (3.18)$$

onde o índice geral  $\beta$  indica a região espacial onde está se realizando a integração.



# Capítulo 4

## Dinâmica de Carga em Sistemas

### Nanoeletromecânicos

Para determinarmos a dinâmica do sistema descrito no capítulo anterior partimos de um operador hamiltoniano geral, dependente do tempo

$$H(t) = H_C(t) + H_E(t) + H_D(t) + H_{EC}(t) + H_{DC}(t) \quad (4.1)$$

onde  $H_C$  representa o hamiltoniano do poço quântico central,  $H_{E,D}$  o hamiltoniano dos dois eletrodos da esquerda e da direita (que no nosso modelo são considerados finitos, ou seja, possuem espectro discreto), e, finalmente,  $H_{EC}$  e  $H_{DC}$  são operadores diagonais que dizem respeito ao acoplamento entre o componente central do dispositivo e os eletrodos da esquerda e direita respectivamente. A dependência temporal no acoplamento surge porque no nosso modelo,  $H_{EC}$  e  $H_{DC}$  contém a informação da probabilidade de ocupação das barreiras de potencial entre os eletrodos e o centro.

A dependência temporal nos operadores anteriores surge pelo fato de

que a estrutura geométrica do arranjo não é rígida, e, no modelo, o poço quântico central pode se movimentar lateralmente, diminuindo a barreira de tunelamento de um lado e aumentando do outro além de reorganizar o espectro do espaço de Hilbert do conjunto como um todo. Esse movimento pode dar-se tanto por forças eletrostáticas entre os eletrodos e o poço quântico central, por exemplo quando há excesso de cargas locais decorrentes da dinâmica quanto por forças externas tais como vibrações do ambiente que fazem o poço quântico central se comportar como um oscilador forçado. Mesmo com a estrutura mantida rígida, podemos ter um hamiltoniano dependente do tempo se aplicarmos uma diferença de potencial dependente do tempo entre os eletrodos, de modo que a posição dos níveis de energia do sistema global evolui no tempo, acarretando novamente um rearranjo geral dos elementos de matriz e da intensidade dos acoplamentos entre os componentes do dispositivo.

Neste trabalho não incluímos as interações eletrostáticas entre as cargas envolvidas na dinâmica, sendo esse um ponto deixado para futuros desenvolvimentos. Assim, entendemos o movimento possível do poço quântico central como sendo devido a fatores externos e a presença ou não de excessos de carga não afeta o movimento mecânico do sistema.

De forma explícita, o hamiltoniano acima fica escrito na forma

$$H(t) = \begin{bmatrix} H_C(t) & H_{EC}(t) & H_{DC}(t) \\ H_{CE}(t) & H_E(t) & 0 \\ H_{CD}(t) & 0 & H_D(t) \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

sendo que cada elemento de matriz  $H_i(t)$  é também uma matriz de ordem  $n$  onde  $n$  é o número total de estados utilizados na simulação. A escolha da



dimensão do sistema é, em princípio, arbitrária. Por um lado, podemos fixar as dimensões espaciais do conjunto, e escolher a energia de Fermi, ou, de modo inverso, fixar a energia de Fermi e variar a amplitude dos eletrodos, por exemplo. Na medida em que ampliamos o tamanho dos eletrodos, esperamos que o sistema se aproxime de um poço quântico acoplado ao contínuo. O espaçamento entre os níveis deve diminuir na mesma medida em que o número de estados total deve aumentar. Na prática, o número total de estados que pode ser utilizado numa simulação dependerá da capacidade computacional disponível.

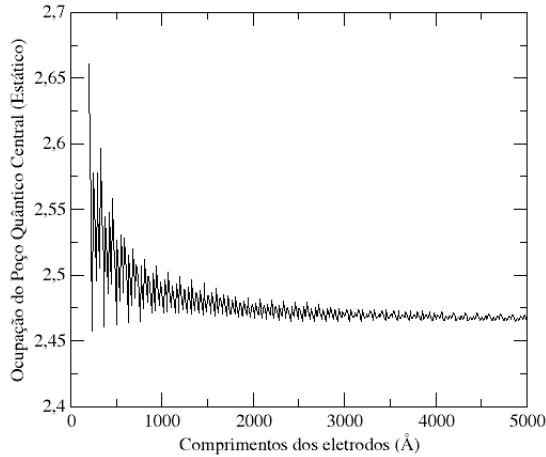


Figura 4.1: Convergencia da população calculada estaticamente para um sistema com duas bandas. Aqui temos que  $V_0 = 0.02$  hartree,  $l_1 = l_3 = 70$  Å,  $l_2 = 100$  Å.

Na figura 4.1 apresentamos a probabilidade de ocupação no centro da estrutura, calculada como a norma das funções de cada estado na região

definida pelo poço quântico em função do comprimento dos eletrodos. Para comprimentos pequenos, observamos que essa probabilidade de ocupação oscila entre 2,45 e 2,6 aproximadamente. Na medida em que os dois eletrodos aumentam de comprimento, observamos a diminuição dessas oscilações, e a probabilidade de ocupação converge para 2,47 aproximadamente (Ver figura 4.1). Podemos considerar esse o limite do contínuo, e essa probabilidade de ocupação pode ser interpretada como sendo a ocupação máxima estacionária do poço quântico central. Na figura 4.2 apresentamos o mesmo caso da figura 4.1 mas considerando agora a situação quando temos uma banda apenas.

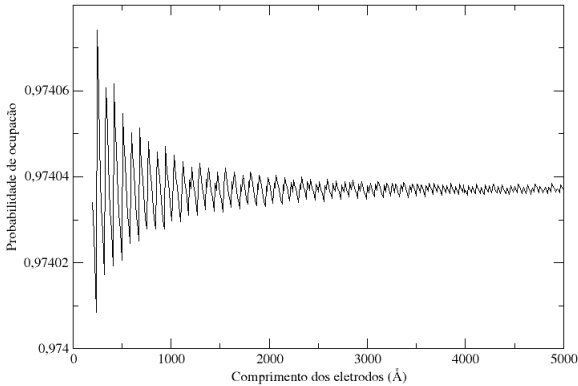


Figura 4.2: Convergência da população calculada estaticamente para um sistema com uma banda. Aqui temos que  $V_0 = 0.02$  hartree,  $l_1 = l_3 = 70$  Å,  $l_2 = 100$  Å.

Um ponto importante a ser ressaltado é que na maioria dos problemas envolvendo o acoplamento de um poço quântico com eletrodos, consideram-se os eletrodos como um reservatório infinito, e cuja relaxação é instantânea. Na abordagem aqui apresentada, os dois eletrodos são compostos por estados discretos, que têm tempos característicos de evolução, coerência entre esta-

dos internos e coerência com o poço quântico central. A parte possível de coerência entre os dois eletrodos no entanto foi suprimida, como indicado pelos zeros nos elementos  $H_{23}$  e  $H_{32}$  no hamiltoniano. Basicamente isso implica que não há possibilidade de tunelamento direto entre eletrodos.

Para resolver a equação de Liouville-von Neumann do sistema e obter a dinâmica das populações, definimos também a matriz densidade global, que é da forma:

$$\rho(t) = \begin{bmatrix} \rho_C(t) & \rho_{EC}(t) & \rho_{DC}(t) \\ \rho_{CE}(t) & \rho_E(t) & 0 \\ \rho_{CD}(t) & 0 & \rho_D(t) \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Como visto, a matriz densidade é separada em cinco matrizes distintas sendo que  $\rho_C$  contém na diagonal as populações de cada estado do poço quântico central e os elementos não diagonais contém as coerências entre os estados. Da mesma maneira,  $\rho_E$  e  $\rho_D$  contém a informação das populações em cada um dos estados dos eletrodos na diagonal e as coerências entre os estados internos nos elementos não diagonais. As matrizes  $\rho_{EC} = \rho_{CE}^*$  e  $\rho_{DC} = \rho_{CD}^*$  podem ser interpretadas como contendo as informações sobre as coerências entre o centro da estrutura e os eletrodos da esquerda e da direita respectivamente. Novamente, não existe conexão entre os eletrodos.

Na ausência de termos dissipativos e de decoerência, com base no modelo explicitado acima, obtemos a dinâmica resolvendo a equação de Liouville-von Neumann

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (4.4)$$

que produz um conjunto de equações diferenciais acopladas de primeira ordem, cada equação dessas, quando resolvida, nos dá a informação sobre a evolução temporal da população em um estado de um dos componentes do sistema (elementos diagonais) ou sobre a evolução temporal das partes reais e imaginárias das coerências entre as populações (elementos não diagonais).

Para iniciar uma simulação, precisamos determinar o conjunto de condições iniciais. No formalismo de matriz densidade isso significa determinar a ocupação dos  $n$  níveis discretos do sistema. Nas simulações que iremos apresentar na sequência dessa dissertação, usamos sempre o mesmo conjunto de condições iniciais. Como desconsideramos o spin das partículas, optamos por considerar que cada estado do gás está completamente ocupado quando sua população é 0.5. Assim, um determinado estado global do sistema tem ocupação máxima igual a 1, em concordância com o princípio de exclusão de Pauli. O formalismo utilizado aqui, devido a conservação do traço da matriz densidade, garante que essa condição nunca será violada. Assim, à temperatura zero, a condição inicial será sempre que a matriz densidade dos dois eletrodos será diagonal, com ocupação meio em cada estado, e que o poço quântico central tem todos os estados desocupados em  $t = 0$ .

Como um primeiro exemplo, vamos considerar o sistema rígido, sem diferença de potencial. Nessas condições, podemos entender o modelo como sendo idêntico a um sistema discreto de  $n$  níveis de energia. É bem conhecido que as populações irão executar oscilações quânticas coerentes no tempo. Na figura 4.3 mostramos a evolução da população no poço quântico central com o tempo. Existe uma frequência dominante, correspondente ao nível de energia mais acoplado ao gás da direita e da esquerda. Os demais estados, que são

### Oscilações num sistema estático.

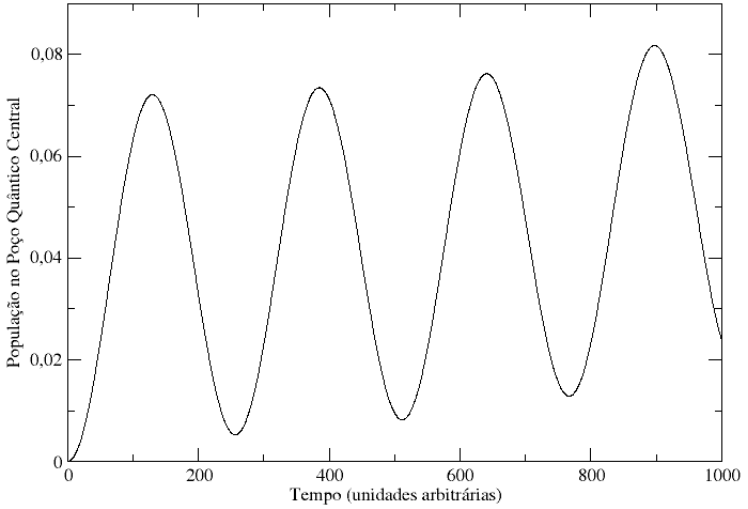


Figura 4.3: População no poço quântico central sem diferença de potencial. A população oscila numa superposição de diferentes frequências características. Aqui temos que  $V_0 = 0.02$  hartree,  $l_0 = 1400$  Å,  $l_1 = l_3 = 70$  Å,  $l_2 = 100$  Å.

menos acoplados são responsáveis, basicamente, pelo fundo de carga que vai sendo acrescido ao centro da estrutura. Apesar da simulação não ter sido levada adiante no tempo, o comportamento do sistema será multi periódico, com periodicidade determinada pelos tempos característicos de evolução de cada um dos seus estados globais.

## 4.1 Dinâmica com diferença de Potencial Dependente do Tempo.

Como discutido anteriormente, o formalismo de matriz densidade é adequado para tratar sistemas onde o operador hamiltoniano é explicitamente dependente do tempo. Essa dependência pode ser decorrente de diversos fatores, como por exemplo, mudanças de configuração espacial no aparato, interação com campo eletromagnético externo dependente do tempo, diferença de potencial aplicada de forma não instantânea, entre outros.

Nessa seção, interessa-nos estudar, com base nas condições iniciais expostas anteriormente, como evolui a carga no poço quântico central quando aplicamos uma diferença de potencial ao sistema. A idéia é que, partindo de uma diferença de potencial nula, podemos acionar um mecanismo que faz essa diferença aumentar até um limite pré-definido, segundo alguma função no tempo.

Notemos aqui que a equação de Liouville-von Neumann (equação 4.4) que define a evolução temporal das populações contém o comutador da matriz densidade com o operador hamiltoniano. O operador hamiltoniano carrega as características físicas do dispositivo que está sendo estudado. Uma vez que essas características estão sendo alteradas por um fator externo, o operador hamiltoniano evolui de maneira independente. Então temos numa mesma equação dois tipos de evolução. A evolução dinâmica das populações, que depende da forma instantânea do operador hamiltoniano e a própria evolução de  $H(t)$ , que depende da “vontade” de um ente externo.

Para reconciliar esses dois tipos de dinâmica é preciso definir algum

esquema de evolução que nos permita capturar os efeitos da variação temporal das características físicas do sistema na evolução das populações. Apesar de existirem diversas possibilidades, que não vamos estudar aqui, optamos pelo mecanismo mais simples. A idéia é que as mudanças estruturais no sistema sejam suficientemente lentas ao ponto de as populações relaxarem completamente antes que o operador hamiltoniano sofra grandes modificações. Em outras palavras, as frequências de oscilação das populações são muito maiores que a frequência com que o operador hamiltoniano pode evoluir.

Com a aproximação acima em mente, podemos resolver a equação de Liouville-von Neumann da seguinte maneira:

- A) em  $t = 0$  diagonalizamos o hamiltoniano conforme o esquema do capítulo III.
- B) definimos as condições iniciais e deixamos a população evoluir até  $t + \Delta t$  mantendo o hamiltoniano fixo em  $H(t = 0)$
- C) mudamos a configuração do sistema e diagonalizamos novamente o hamiltoniano, que passa a ser  $H(t + \Delta t)$
- D) a dinâmica das populações recomeça, agora com  $H(t + \Delta t)$  e com condições iniciais  $\rho(t + \Delta t)$
- E) o processo é repetido até atingirmos um tempo desejado.

Na figura 4.4 apresentamos uma simulação realizada segundo o esquema anterior, sendo que a diferença de potencial varia linearmente no tempo, desde  $\Delta V = 0$  até  $\Delta V = 0.01$  hartree durante o período completo da simulação. Vale ressaltar que o tempo, neste trabalho, está em unidades arbitrárias. Até o

momento não conseguimos determinar de maneira inequívoca qual é a escala de tempo de evolução do sistema simulado. Em termos fenomenológicos, o

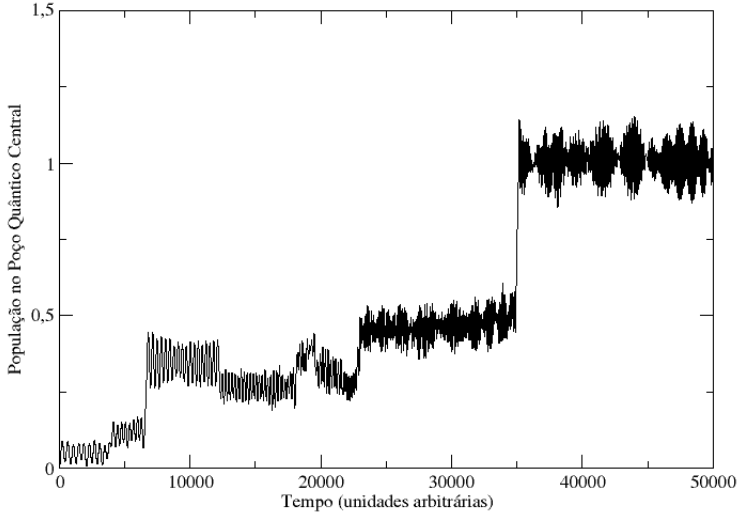


Figura 4.4: Carga no poço quântico central quando a diferença de potencial varia linearmente no tempo desde 0 até 0.01 hartree. Aqui  $V_0 = 0.02$  hartree,  $l_1 = l_3 = 70 \text{ \AA}$  e  $l_2 = 100 \text{ \AA}$ .

que percebemos é que o processo de carga do sistema se dá em etapas distintas. Durante alguns intervalos, temos apenas oscilações de carga, com o poço quântico central trocando carga com os eletrodos. Isso ocorre, aproximadamente desde 0 até 7000 unidades de tempo (ut). Nesse instante, temos uma mudança de regime, seguida novamente de um período de oscilações até 35.000 unidades de tempo, onde ocorre novamente um salto seguido de oscilação de carga. Ao atingir o fim da simulação, o poço quântico central tem sua carga total aproximadamente igual à unidade. Isso é esperado já que temos uma banda disponível, com capacidade de carga aproximadamente igual



à unidade.

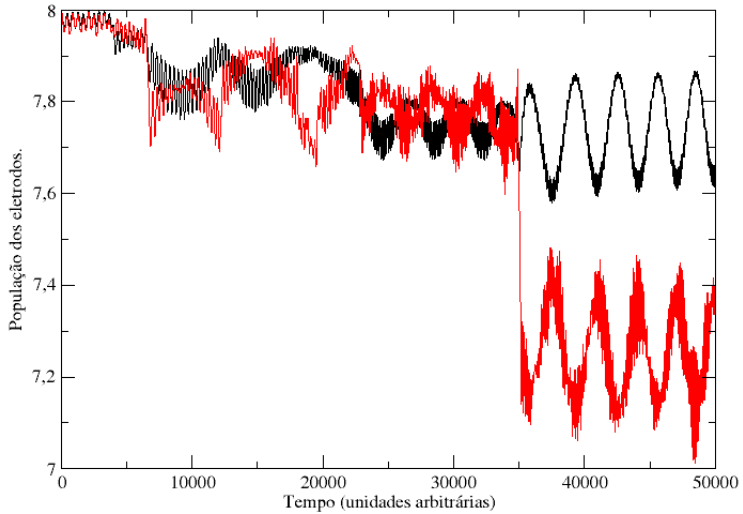


Figura 4.5: População no gás da esquerda (Preto) e no gás da direita (Verme-lho) para as mesmas condições que a figura 4.4.

Na figura 4.5 apresentamos a variação de carga nos eletrodos, durante a mesma simulação discutida anteriormente. Nesse gráfico, temos uma melhor possibilidade de entender como se dá o processo de transferência de carga. Até 7000 unidades de tempo a carga nos dois eletrodos oscila aproximadamente em fase. Vamos lembrar que o sistema, em  $t = 0$  é simétrico, com as duas barreiras tendo a mesma largura, e a diferença de potencial é nula. Então a carga é doada e retirada do poço quântico central por ambos os eletrodos. Em 7000 unidades de tempo, atinge-se uma diferença de potencial que é suficiente para reorganizar de maneira significativa o espaço de Hilbert do sistema todo. Ocorre então uma rápida transferência de carga dos eletrodos para o centro da estrutura, cuja soma é aproximadamente 0.5. Essa

rápida transferência de carga indica que o acoplamento entre o poço quântico central e os eletrodos aumentou significativamente nesse instante. Isso fica evidente quando observamos que a amplitude das oscilações que se seguem é muito maior que anteriormente. A carga no poço quântico central fica aproximadamente estável porque as oscilações entre os eletrodos estão defasadas. Basicamente o centro da estrutura está recebendo carga de um lado e doando carga para o outro. Esse regime se mantém até 35.000 ut. Novamente, nesse instante, a diferença de potencial aplicada é suficiente para reordenar o sistema. Temos uma brusca transferência de carga (de meia unidade) seguida de oscilações defasadas entre os eletrodos. Notemos que esse regime final é distinto do anterior. Apenas o gás da direita transfere a carga. Isso indica que o poço quântico central e o gás entraram em ressonância, sendo que um dos estados do gás praticamente foi esvaziado, tendo a carga sido transferida para o centro. Esse instante é seguido por amplas oscilações de carga, perfeitamente defasadas, de modo que a carga no centro mantêm-se praticamente constante.

A conclusão dessa seção é a de que o processo de carga de um poço quântico quando acoplado a eletrodos finitos, que tem estados discretos é bastante não linear, e de certa maneira, imprevisível. Pequenas modificações na arquitetura do sistema podem acarretar comportamentos diversos. É preciso lembrar que dispositivos construídos pelo homem sempre terão defeitos, diferenças de tamanho, assimetrias, etc. A maneira como a diferença de potencial é aplicada também pode ser crucial. Supondo que o potencial aumente muito lentamente, o sistema tem mais tempo de relaxar, o que pode significar

que o poço quântico central atinge sua carga plena num tempo mais curto, talvez não passando pelos diversos regimes descritos anteriormente. No lado oposto, nitidamente, se o potencial é aplicado muito rapidamente a dinâmica pode ser completamente diferente, não havendo tempo para que haja transferência significativa de carga quando o sistema atinge as configurações de ressonância.

## **4.2 Dinâmica sem diferença de Potencial com Poço Quântico Central Móvel.**

Nessa seção vamos estudar a dinâmica de populações quando o sistema executa movimentos mecânicos. Basicamente, teremos dois eletrodos acoplados a um poço quântico que devido a sua arquitetura pode executar oscilações aproximando-se e afastando-se dos eletrodos. As oscilações aqui consideradas serão induzidas por fatores externos como vibrações do ambiente transmitidas ao dispositivo ou qualquer outro dispositivo externo capaz de fazer oscilar o centro da estrutura.

Nesse contexto, a maneira de resolver a equação de Liouville-von Neumann é a mesma que apresentada na seção anterior. Inicialmente partimos de um sistema simétrico, diagonalizamos o operador hamiltoniano, resolvemos a dinâmica com  $H(t)$  fixo, modificamos a configuração do sistema, ou seja, mudamos a posição do poço quântico central e rediagonalizamos  $H$ , então redefinimos as condições iniciais como  $\rho(t + \Delta t)$  e assim por diante. O centro da estrutura movimenta-se da esquerda para a direita de modo harmônico. Para cada ciclo completo (uma ida e volta do poço quântico cen-

tral), diagonalizamos a hamiltoniana 400 vezes, de modo a não termos grandes saltos espaciais entre uma configuração e outra.

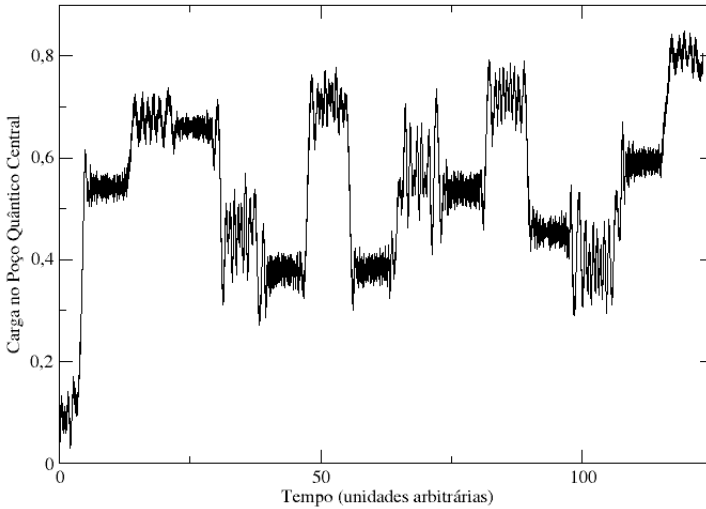


Figura 4.6: Processo de carga no poço quântico central quando está movendo-se sem diferença de potencial aplicada. Apenas uma banda é considerada na simulação. O período do movimento é 20 unidades de tempo.

Na figura 4.6 apresentamos a dinâmica de carga do poço quântico central obtida segundo o que foi descrito anteriormente. Apenas uma banda é considerada na simulação. O período do movimento completo do poço quântico central é de 20 ut.

Como fica evidente pela figura, a transferência de carga se dá de maneira aproximadamente discreta. Em alguns ciclos temos transferência de carga de um dos eletrodos para o centro da estrutura, em outros a corrente se inverte, e há uma descarga parcial. Em períodos intermediários de tempo, correspondentes a 10 ut, a carga permanece estabilizada no sistema. Os mo-

tivos fenomenológicos desse comportamento são apresentados no próximo parágrafo.

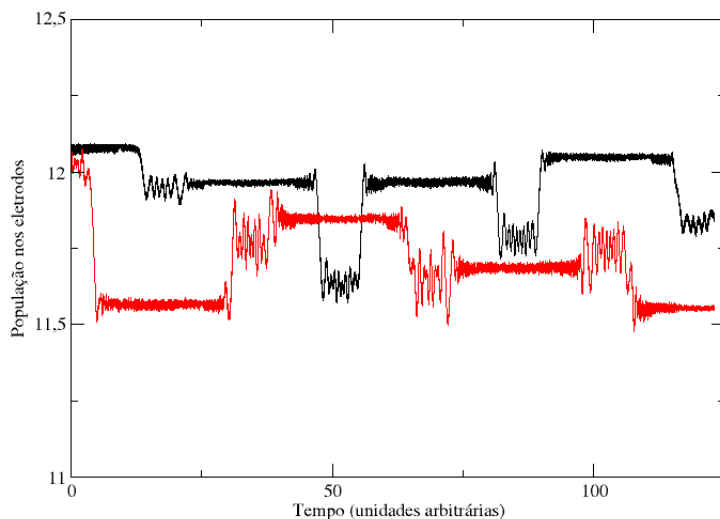


Figura 4.7: Apresentamos aqui a mesma situação da figura 4.6 com a parte Vermelha representando o gás da direita e a parte preta o gás da esquerda.

Observando o comportamento da carga total nos eletrodos, podemos vislumbrar melhor os aspectos físicos da transferência de carga devido ao movimento do centro da estrutura. Na figura 4.7 temos, em vermelho a população do gás da direita e em preto a população do gás da esquerda. No instante inicial, o sistema é completamente simétrico, e há pouco acoplamento entre as partes. O poço quântico central inicia uma oscilação no sentido da direita. Isso acarreta uma diminuição da barreira de tunelamento entre o centro da estrutura e o eletrodo da direita, o que permite, em torno de 5 ut uma rápida transferência de carga. O poço quântico central fica então parcialmente carregado, e, posteriormente retorna, passa pela posição

de equilíbrio e se desloca para a esquerda. Novamente, a barreira de tunelamento é diminuída entre o gás da esquerda e o centro da estrutura. No entanto, a quantidade de carga transferida agora é menor. Essa transferência ocorre em torno de 15 ut na simulação. O motivo para não haver simetria de transferência de carga entre o componente da direita e da esquerda vem do fato de que, na primeira aproximação do poço quântico central com a direita, todos os seus estados estavam vazios. Quando o poço quântico central se aproxima da esquerda, com estados já parcialmente ocupados a transferência de carga não é mais tão eficiente. Mesmo assim, ainda há possibilidade de transferência. Quando o poço quântico central se aproximar novamente da esquerda, a situação será distinta. Agora temos os seus estados ocupados, e parte dos estados do eletrodo vazios. O fluxo de carga se inverte. O poço quântico central cede parte da carga que acumulou para o gás. Um esquema geral desse comportamento é apresentado na figura 4.8.

No diagrama mostrado na figura 4.8, vemos um esboço geral da dinâmica descrita anteriormente. Os círculos fechados representam estados cheios e os círculos abertos estados vazios. As setas superiores indicam a direção de movimento do componente oscilante, e as setas curvas a direção de transferência de carga. Cabe ressaltar que uma vez que a transferência de carga nunca é 100 % eficiente, não há uma periodicidade definida para o sistema. A cada aproximação ou afastamento de um dos lados do dispositivo, a quantidade de carga contida no componente central é diferente, a população dos diversos estados também, e assim, a dinâmica como um todo não pode ser previsível a longo prazo.

A complexidade da dinâmica descrita acima pode ser vista na figura

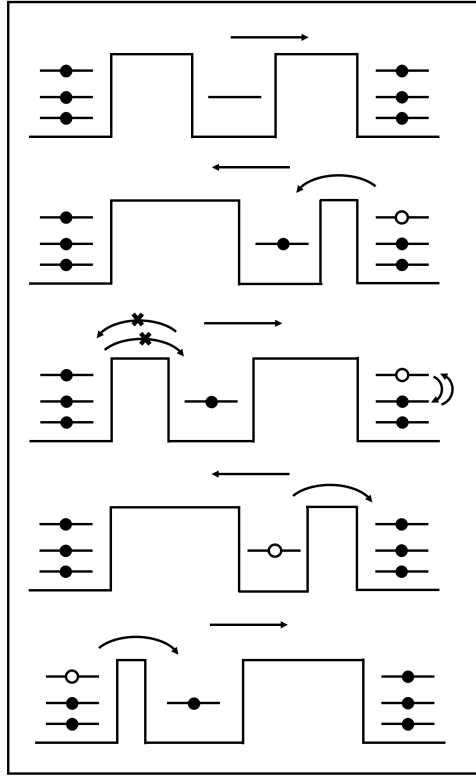


Figura 4.8: Diagrama esquemático dos dois primeiros ciclos descritos anteriormente.

4.9 e na figura 4.10. Nelas plotamos, para 50 ut (o que corresponde a dois ciclos completos) a população de cada estado do poço quântico central e dos eletrodos levados em conta na simulação. Note que, em certos instantes, estados específicos doam carga, e posteriormente podem receber novamente. Para tempos longos de simulação, estados são pouco acoplados, cujo tempo de transferência é longo podem contribuir com uma parcela significativa da carga líquida envolvida no processo. Além disso, processos de relaxação po-

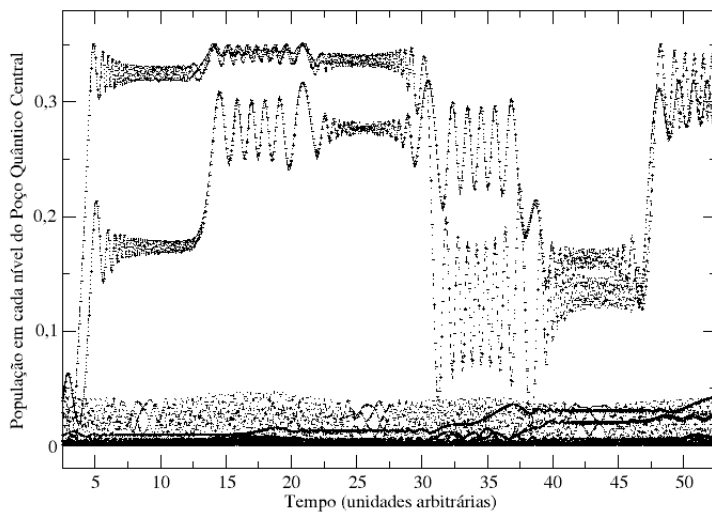


Figura 4.9: A população em cada estado do poço quântico central desde 0 até 50 unidades de tempo.

dem transferir carga entre estados. A soma de todos esses fatores transforma o processo de transferência de carga, mesmo nesse modelo simplificado que tratamos bastante complexo e imprevisível.

Como um último exemplo, na próxima seção vamos tratar um sistema móvel sujeito a uma diferença de potencial.



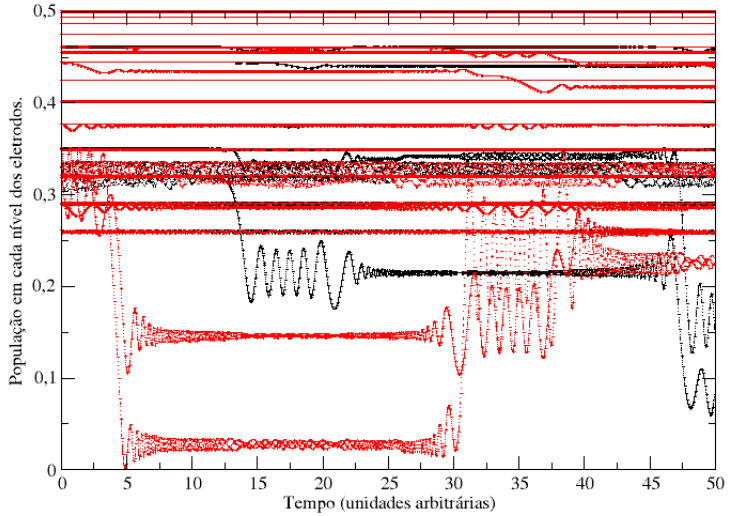


Figura 4.10: População em cada estado do gás da direita e do gás da esquerda no tempo.

### 4.3 Poço Quântico Central Móvel com Diferença de Potencial.

Para finalizar essa breve análise das possibilidades apresentadas por um sistema móvel conectado á eletrodos finitos, vamos tratar de um sistema que está sujeito a uma diferença de potencial fixa, e que pode se mover harmonicamente como na seção anterior. Os parâmetros são  $V_0 = 0.02$ , com  $\Delta V = 0.01$ . Nas figuras (Figura 4.11 e Figura 4.12), o poço quântico central completa um período em 50.000 ut. Ao contrário da simulação anterior, a configuração do aparato com diferença de potencial, nesse caso, acarreta uma dinâmica bastante singular. Por um lado, quando o poço quântico se aproxima da direita, por motivos ainda não totalmente claros, os dois eletrodos

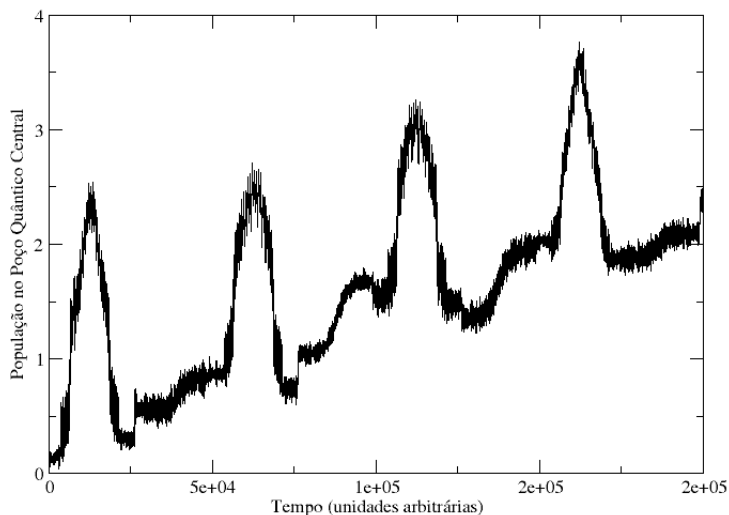


Figura 4.11: População no poço quântico central quando está sujeito a uma diferença de potencial fixa e em movimento harmônico. Aqui temos que  $\Delta V = 0.01$  hartree,  $V_0 = 0.02$  hartree. O período de oscilação é 50.000 unidades de tempo.

transferem carga em fase. O poço quântico entra em ressonância simultaneamente com os dois eletrodos, recebe e devolve carga de maneira aproximadamente simétrica. Ao mesmo tempo, a diferença de potencial favorece a transferência de carga não ressonante do eletrodo da esquerda para o centro, como pode ser visto na figura 4.12. Essa transferência não ressonante é responsável pelo crescimento quase linear da carga no poço quântico central, e pela queda quase linear da carga no gás da direita. Podemos dizer que nesse regime temos um termo quântico, devido ao tunelamento ressonante, e um termo “clássico” ôhmico de transferência de carga, devido à diferença de potencial. Evidentemente, como nosso sistema é finito, para tempos mais longos a dinâmica deverá ser alterada. Na medida em que o poço quântico central

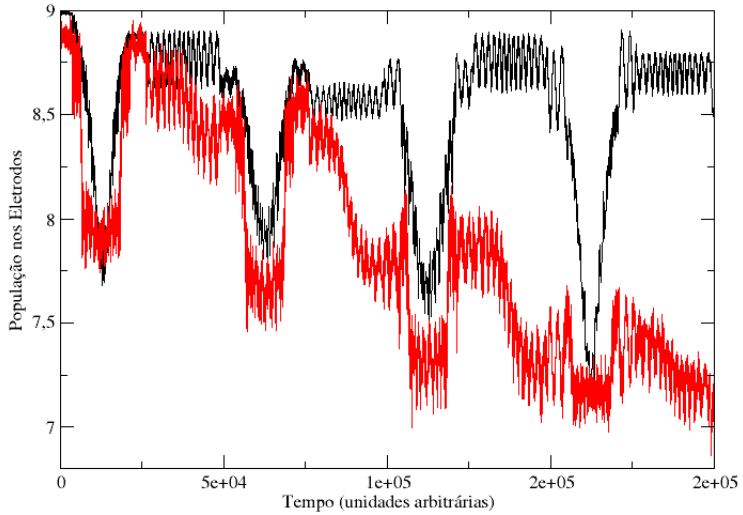


Figura 4.12: População nos eletrodos quando temos uma diferença de potencial fixa e o poço quântico central em movimento harmônico. Aqui temos que  $\Delta V = 0.01$  hartree,  $V_0 = 0.02$  hartree. O período de oscilação é 50.000 unidades de tempo. Em preto temos o gás da esquerda e em vermelho o gás da direita.

estiver saturado de carga, deverá ocorrer uma inversão no fluxo. Assim, podemos interpretar o comportamento apresentado na figura 4.11 e na figura 4.12 como sendo um comportamento transiente, que possivelmente poderia ser observado em sistemas reais.



# Capítulo 5

## Conclusões e Perspectivas

Nesse trabalho apresentamos uma abordagem baseada puramente na mecânica quântica para tratar dinâmica de carga num dispositivo nanoeletromecânico. Nossa aproximação é baseada na idéia de que um poço quântico acoplado a eletrodos condutores pode ser simulado através de um modelo onde os eletrodos são tratados como poços discretos, acoplados entre si.

Para a construção do operador hamiltoniano modelo do sistema, a proposta consiste em diagonalizar exatamente o sistema eletrodo-poço quântico-eletrodo através da solução estacionária da equação de Schrödinger, e posteriormente particionar o sistema usando como constantes de acoplamento as superposições entre funções de onda dos diversos componentes na região das barreiras de potencial.

Essa abordagem nos permitiu reproduzir, de maneira consistente, a estrutura de bandas de um poço quântico acoplado com o contínuo, descrevendo, de maneira coerente, o alargamento de níveis ocasionado devido a esse acoplamento, assimetrias na estrutura de bandas bem como diferenças

de tempos de vida em cada banda.

Para realizar os cálculos dinâmicos resolvemos a equação de Liouville-von Neumann, com hamiltoniano dependente do tempo conforme modelo descrito anteriormente. O esquema de solução baseia-se na diagonalização da hamiltoniana, cálculo de dinâmica efetuado via solução computacional das equações de movimento provenientes da equação de Liouville-von Neumann durante um curto intervalo de tempo, rediagonalização para nova configuração, redefinição de condições iniciais, via um processo sequencial iterativo até o tempo desejado para a simulação.

Como aplicações do método, calculamos

- A) dinâmica com diferença de potencial variável no tempo, onde mostramos que a transferência de carga dá-se de maneira aproximadamente discreta, com períodos intercalados de oscilações coerentes da carga entre o poço quântico e os eletrodos.
- B) dinâmica de carga com poço quântico móvel sem diferença de potencial, onde demonstramos que o processo é parcialmente previsível durante os intervalos iniciais de simulação, consistindo de transferência ressonante de carga entre eletrodos e o poço quântico, bloqueio de transferência, transferência poço quântico-eletrodo, etc, num processo que ocorre a cada dois períodos distintos, devido ao princípio de Pauli. Para tempos maiores de simulação, a dinâmica assume características mais complexas, devido a redistribuição aleatória de carga entre os diversos estados do sistema.
- C) dinâmica de carga tanto com movimento mecânico quanto com diferença

de potencial, onde mostramos que a dinâmica transiente pode ser composta de componentes ôhmicos e discretos, um composto de transferência entre estados não ressonantes, outra entre estados ressonantes. Esse exemplo também evidencia que a configuração específica do sistema pode resultar em processos dinâmicos muito diferentes entre si.

O que conseguimos mostrar até aqui é que a abordagem proposta é promissora, podendo ser usada para simular e prever propriedades interessantes em sistemas nanoeletromecânicos. Mas, para tal, alguns pontos ainda precisam ser melhor desenvolvidos; citamos, entre outros:

- A) Determinar qual o tempo real em que as simulações estão ocorrendo.
- B) Adicionar, no formalismo de Liouville-von Neumann efeitos de temperatura.
- C) Adicionar efeitos de decoerência via operador de Lindblad.
- D) Otimizar os programas computacionais de modo a permitir simulações com um número mais expressivo de estados quânticos, uma vez que, na forma atual o tempo de computação é proibitivo se usarmos mais de 100 estados.
- E) Escrever um hamiltoniano modelo que contenha mais de um poço quântico móvel, o que nos permitiria estudar efeitos relacionados as diferenças de frequência de oscilação de cada poço quântico.

Alguns dos itens acima já estão em fase de desenvolvimento e esperamos que num futuro breve tenhamos novos resultados.





# Apêndice A

## Postulados da Mecânica Quântica

### *Postulado I :*

O estado de um sistema físico no tempo  $t_0$  é definido especificando o vetor de estado  $|\Psi(t_0)\rangle$  pertencente ao espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ .

### *Postulado II :*

Uma quantidade física mensurável  $A$  é descrita por um observável  $\hat{A}$  atuando sobre  $\mathcal{H}$ .

### *Postulado III :*

Os possíveis resultados na medição de uma quantidade física são os autovalores do correspondente observável  $\hat{A}$ .

### *Postulado IV :*

Seja  $A$  uma quantidade física representada por um observável  $\hat{A}$ . Suponha-se que o sistema está num estado normalizado  $|\Psi\rangle$ , tal que  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ . Quando  $A$  é medido, a probabilidade  $P(a_n)$  de se obter o autovalor  $a_n$  de  $A$  é:

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \Psi \rangle|^2 \quad (\text{A.1})$$

onde  $g_n$  é a degenerescência de  $a_n$  e  $|u_n^1\rangle, |u_n^2\rangle \dots |u_n^{g_n}\rangle$  forma uma base ortonormal do subespaço  $\epsilon_n$  que consiste de autovetores de  $\hat{A}$  com autovalores  $a_n$ .

*Postulado V :*

Se a medida da quantidade  $A$  sobre um sistema físico no estado  $|\Psi\rangle$  fornece o resultado  $a_n$ , imediatamente depois da medida o estado é dado pela projeção normalizada de  $|\Psi\rangle$  sobre o espaço próprio  $\epsilon_n$  associado com  $a_n$ ; isso é,  $\frac{1}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}}P_n|\Psi\rangle$ , onde  $P_n$  é o operador de projeção sobre  $\epsilon_n$ .

*Postulado VI :*

A evolução temporal de um vetor de estado  $|\Psi(t)\rangle$  de um sistema físico é governada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \quad (\text{A.2})$$

onde  $\hat{H}(t)$  é o observável correspondente ao hamiltoniano clássico do sistema.

# Bibliografia

- [1] Feynman R. P.- There's plenty of room at the bottom, *J. Microelectromech. Syst.* **1** p 60-66 (1992).
- [2] Nathanson H. C.; Newell W. E.; Wickstrom R. A.; Davis J. R. - The resonant gate transistor, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **14** p 117-133 (1967).
- [3] Pelesko J. A. and Bernstein D. H. - Modeling MEMS and NEMS, *Chapman Hall/CRC. Boca Raton, FL, EEUU.* p 390 (2002).
- [4] Cleland A. N. and Roukes M. L. - Fabrication of high frequency nanometer scale mechanical resonators from bulk Si crystals, *Appl. Phys. Lett.* **69** p 2653-2655 (1996).
- [5] Li, H. J.; Wong, S. M.; Zhang, G.; X. Sun P. G-Q Lo.; D-L Kwong, *Appl. Phys. Lett.*, **95**, p. 033102 (2009).
- [6] Law, M.; Greene, L. E.; Johnson, J. C.; Saykally, R.; Yang, P.- Nanowire dye-sensitized solar cells, *Nat. Materials.*, **4**, p. 455-459 (2005).
- [7] R. I. Shekhter.; L. Y. Gorelik.; I. V. Krive.; M. N. Kiselev.; A. V. Parafilo and M. Jonson- Nanoelectromechanics of shuttle devices, *Versita.*, **0001**, p. 1-25 (2013).
- [8] Kim, Chulki; Prada, Marta; Blick, Robert H.- Coulomb Blockade in a Coupled Nanomechanical Electron Shuttle, *ACS. NANO*, **6**, p. 651 - 655 (2011).
- [9] Cohen, G.; Fleurov, V.; Kikoin, K.- Time-dependent single electron tunneling through a shuttling nanoisland, *Phys. Rev. B*, **79**, p. 1-11 (2009).
- [10] L. Y. Gorelik; A. Isacson; M. V. Voinova; B. Kasemo; R. I. Shekhter and M. Jonson - Shuttle Mechanism for Charge Transfer in Coulomb Blockade Nanostructures, *Phys. Rev. Lett.*, **80(20)**, 4526 (1998).

- [11] A. Isacsson; L. Y. Gorelik; M. V. Voinova; B. Kasemo; R. I. Shekhter and M. Jonson, - Shuttle instability in self-assembled Coulomb blockade nanostructures, *Physica B*, **255**, p. 150-163 (1998).
- [12] C. Weiss and W. Zwerger, - Accuracy of a mechanical single-electron shuttle, *Europhys. Lett.*, **47(1)**, p. 97-103 (1999).
- [13] N. Nishiguchi, - Gate voltage dependence of a single-electron transistor using the shuttle mechanism, *Phys. Rev. B*, **65(3)**, 035403 (2001).
- [14] F. Pistolesi, - Full counting statistics of a charge shuttle, *Phys. Rev. B*, **69(24)**, 245409 (2004).
- [15] T. Nord and A. Isacsson, - Impact of van der Waals forces on the classical shuttle instability, *Phys. Rev. B*, **69(3)**, 35309 (2004).
- [16] Prada, M.; Platero, G.- Double coupled electron shuttle, *Phys. Rev. B*, **86**, p. 1-13 (2012).
- [17] Kim, Chulki; Prada, Marta; Platero, Gloria; Blick, R.H.- Realizing Broadbands of Strong Nonlinear Coupling in Nanoelectromechanical Electron Shuttles, *Phys. Rev. Lett.*, **111**, p. 1-5 (2013).
- [18] A. D. Armour and A. MacKinnon, - Transport via a quantum shuttle, *Phys. Rev. B*, **66(3)**, 035333 (2002).
- [19] T. Novotný; A. Donarini and A.-P. Jauho, - Quantum Shuttle in Phase Space, *Phys. Rev. Lett.*, **90(25)**, 256801(2003).
- [20] D. Fedorets; L. Y. Gorelik; R. I. Shekhter and M. Jonson, - Quantum Shuttle Phenomena in a Nanoelectromechanical Single-Electron Transistor, *Phys. Rev. Lett.*, **92(16)**, 166801 (2004).
- [21] Cimalla V.; Niebelschütz F.; Tonisch K.; Foerster Ch.; Brueckner K.; Cimalla I.; Friedrich; Pezoldt J.; Stephan R.; Hein M. and Ambacher O. - Nanoelectromechanical devices for sensing applications, *Sensors and Actuators B*, **126**, p. 24-34 (2007).
- [22] LaHaye M.D.; Buu O.; Camarota B. and Schwab K.C. - Approaching the quantum limit of a nanomechanical resonator, *Science*, **304(5667)**, p. 74-77 (2004).
- [23] Peng H.B.; Chang C.W.; S Aloni.; Yuzvinsky T.D. and Zettl A. - Microwave electromechanical resonator consisting of clamped carbon nanotubes in an abacus arrangement, *Phys. Rev. B*, **76(3)**, 035405(5p) (2007).

- [24] Fennimore A.M.; Yuzvinsky T.D.; Han W.-Q.; Fuhrer M.S.; Cumings J. and Zettl A. - Rotational actuators based on carbon nanotubes, *Nature*, **424**, p. 408-410 (2003).
- [25] Li M.; Tang H.X. and Roukes M.L. - Ultra-sensitive NEMS-based cantilevers for sensing, scanned probe and very high-frequency applications, *Nature Nanotech*, **2**, p. 114-120 (2006).
- [26] Cleland A. N.; Pophristic N.; Fergurson I. - Single crystal aluminum nitride nanomechanical resonators, *Appl. Phys. Lett.* **79** p 2070-2072 (2001).
- [27] Hagleitner C.; Hierlemann A.; Lange D.; Kummer A.; Kerness N.; Brand O.; Baltes H. - Smart single-chip gas sensor microsystem, *Nature* **414** p 293-296 (2001).
- [28] Forsen E.; Abadal G.; Ghatnekar Nilsson S.; Teva J.; Verd J.; Sandberg R.; Svendsen W.; Pérez Murano F.; Esteve J.; Figueras E.; Campabadal F.; Montelius L.; Barniol N.; Boisen A. - Ultrasensitive mass sensor fully integrated with complementary metal-oxide-semiconductor circuitry *Appl. Phys. Lett.* **87** p 043507 (2005).
- [29] Yang Y. T.; Callegari C.; Feng X. L.; Ekinici K. L. and Roukes M.L. - Zeptogram-scale nanomechanical mass sensing, *Nano Lett.*, **6**, p. 583-586 (2006).
- [30] Karl Blum - Density Matrix Theory and Applications, *Plenum Press*, p. 37-61 (1981).
- [31] Abraham Nitzan - Chemical Dynamics in Condensed Phases. Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems, *Oxford University Press*, p. 347-398 (2006).
- [32] William H. Louisell- Quantum Statistical Properties of Radiation, *John Wiley and Sons*, p. 74 - 84; p 331 - 408 (1924).
- [33] Fano. U. - Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques, *Phys. Rev. Lett.*, **29**, 74 (1957).
- [34] Ter Haar. B., - Theory and Application of The Density Matrix, *Rep. Prog. Phys.*, **24**, 304 (1961).
- [35] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin., - Física Do Estado Sólido, *Cengage Learning*, p. 32 - 62 (2011).